

# 化学研究と人工知能技術の融合に関する基礎と応用事例 ～化学反応予測・実験条件最適化・量子化学理論の高度化を例として～

## 講師：清野淳司氏

### 早稲田大学 理工学術院総合研究所

### 次席研究員/研究院講師 JST さきがけ研究者

近年、人工知能（AI）技術は、化学分野における実験・理論・計算の様々な領域で活用され始めている。本セミナーでは、化学の諸分野とAI技術の融合研究を実施するための基礎を説明する。またこれらに関する幾つかの具体的な研究事例（反応予測、実験条件最適化、量子化学理論の高度化）や将来的な展望を述べたい。

【経歴】2010年に首都大学東京大学院理工学研究科分子物質化学専攻にて博士（理学）を取得。その後、早稲田大学理工学術院助手、日本学術振興会特別研究員（PD）を経て、2015年より現職。また、2017年10月より科学技術振興機構さきがけ研究員を兼任。

【研究歴】これまで、周期表上のあらゆる元素を含む物質・材料に適用可能な大規模相対論的量子化学理論・プログラムの開発、およびインフォマティクスとの融合による量子化学の深化と化学の諸問題への応用を行ってきた。

開催日時	2020年11月30日（月）13：30～16：30	※本セミナーは、 <b>当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナー</b> となります。推奨環境は当該ツールをご参照ください。後日、視聴用のURLを別途メールにてご連絡いたします。 <b>詳細は裏面をご覧ください。</b>
受講料	45,000円（+税）※資料付 *メルマガ登録者 36,000円（+税）20%OFF *アカデミック価格 24,000円（+税）	

\*アカデミック価格：学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】通常の特典（2名目無料、3名目以降半額）は適用外となりますが、**定価の20%引き**でご参加いただけます。

★【セミナー対象者】化学に関連した研究に従事しており、人工知能技術の活用・発展に興味のある研究者・技術者

★【得られる知識】化学における人工知能技術の基礎知識（機械学習・進化的計算・化学における記述子）人工知能技術を導入した最新の化学研究事例（化学反応の予測・実験条件最適化・高速な量子化学計算手法など）

#### 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- 人工知能技術の概要
  - 化学と人工知能技術
  - 人工知能技術の種類と特徴
  - 機械学習の概要
  - 進化的計算の概要
- 化学における記述子
  - 構造的特徴を表した記述子
  - 電子的特徴を表した記述子
- 機械学習と実験・計算による化学反応予測
  - 反応予測システムの歴史
  - 機械学習と電子状態情報を用いた反応予測の研究事例
  - 均一系触媒における有機化学反応に対する反応予測への適用
  - 将来展望
- 機械学習と実験/計算による反応条件最適化
  - 近年の実験条件最適化研究の動向
  - 実験条件最適化における研究事例
  - 溶媒条件最適化における研究事例
  - 将来展望
- 機械学習による量子化学理論の高度化
  - 密度汎関数理論における研究事例
  - 波動関数理論における研究事例
  - 将来展望

弊社記入欄		セミナー申込書			
セミナー名		化学研究と人工知能技術の融合に関する基礎と応用事例 ～化学反応予測・実験条件最適化・量子化学理論の高度化を例として～			
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、 登録希望の場合は○↓		会社名（団体名）	TEL：		
		住所 〒	FAX：		
			E-mail：		
会員登録 済み	新規 登録希望	部署	役職	氏名	
お支払方法		銀行振込 ・ その他		お支払予定	2020年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail (re@cmcre.com) でお申し込みください。

■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしていません、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。

■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町2-7 TEL 03-3293-7053

■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号  
**03-3291-5789**

2020年11月30日（月）開催

# 化学研究と人工知能技術の融合に関する基礎と応用事例 ～化学反応予測・実験条件最適化・量子化学理論の高度化を例として～

## 講師：清野淳司氏

### 早稲田大学 理工学術院総合研究所

### 次席研究員/研究院講師 JST さきがけ研究者

当該セミナーは、**ライブ配信のウェビナー（オンラインセミナー）**です！

#### 【ライブ配信対応セミナー】

- 本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。お申し込み前に、下記 URL より視聴環境をご確認ください。  
→ <https://zoom.us/test>
- 当日はリアルタイムで講師へのご質問も可能です。
- タブレットやスマートフォンでも視聴できます。
- お手元の PC 等にカメラ、マイク等がなくてもご視聴いただけます。この場合、音声での質問はできませんが、チャット機能、Q&A 機能はご利用いただけます。
- ただし、セミナー中の質問形式や講師との個別のやり取りは講師の判断によります。ご了承ください。
- 「Zoom」についてはこちら↓をご参照ください。  
<https://zoom.us/jp-jp/meetings.html>

#### 【お申込み後の流れ】

- 開催前日までに、ウェビナー事前登録用のメールをお送りいたします。お手数ですがお名前とメールアドレスのご登録をお願いいたします。
- 事前登録完了後、ウェビナー参加用 URL をお送りいたします。
- セミナー開催日時に、参加用 URL よりログインいただき、ご視聴ください。
- 講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみのご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固く禁じます。
- 資料を冊子で配布する場合は、事前にご登録のご住所に発送いたします。開催日時に間に合わない場合には、後日お送りするなどの方法で対応いたします。

#### 【注意事項】

- 本セミナーの受講にあたっての推奨環境は「Zoom」に依存します。受講者の方のお手元の PC などの設定や通信環境が受信の状況に大きく影響いたしますので、ご自分の環境が対応しているか、お申し込み前の確認をお勧めいたします。

<https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC->

[MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6](https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC-MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6)

- Zoom クライアントは最新版にアップデートして使用してください。
- インターネット経由でのライブ中継ですので、回線状態などにより、画像や音声乱れる場合があります。また、状況によっては、講義を中断し、再接続して再開する場合がありますが、予めご了承ください。
- 万が一、当社や講師側（開催側）のインターネット回線状況や設備機材の不具合により、開催を中止した場合には、受講料の返金や、状況により後日録画を提供すること等で対応させていただきます。
- 本セミナーはお申し込みいただいた方のみ受講いただけます。複数端末から同時に視聴することや複数人での視聴は禁止いたします。
- 受講中の録音・撮影等は固く禁じます。
- Zoom のグループにパスワードを設定しています。お申込者以外の参加を防ぐため、パスワードを外部に漏洩しないでください。万が一外部者が侵入した場合は管理者側で部外者の退出あるいはセミナーを終了いたします。