

データ駆動型化学の展開

～インフォマティクスの基礎と材料設計への応用～

講師：船津 公人氏

東京大学 工学系研究科化学システム工学専攻 教授

データ駆動型化学を実践する上でのデータの見方や取り扱いの考え方を、事例を通して理解することを目的とする。分子設計、材料設計、そしてプロセスの監視と制御までを扱うことで、データ解析が拓く可能性を概観する。

【講師経歴】 昭和 53 年 九州大学理学部化学科卒業、昭和 55 年 九州大学大学院理学研究科化学専攻修士課程修了、昭和 58 年 九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了 理学博士、昭和 59 年 豊橋技術科学大学工学部物質工学系助手、昭和 63 年 同 知識情報工学系助手、平成 4 年 同 助教授、平成 16 年～ 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授、現在に至る
平成 23 年 ストラスブール大学招聘教授
平成 29 年 10 月～ 奈良先端科学技術大学院大学・データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター

【受賞】・アメリカ化学会 Herman Skolnik 賞 (2018 年 9 月)

http://www.t.u-tokyo.ac.jp/foe/topics/setnws_201810021050114857435259.html

・Molecular Informatics, Best paper Award 2017 (2018 年 1 月)、・化学工学会 SIS 部会技術賞 (2016 年 9 月)

・日本コンピュータ化学学会賞 (2003 年 5 月)、・日本化学会・Bulletin of Chemical Society of Japan (BCSJ)論文賞 (2001 年 3 月)、受賞対象論文：Bull. Chem. Soc. Jpn., 73, 1955-1965 (2000)、・日本科学技術情報センター 丹羽賞・学術賞 (昭和 63 年 4 月) 「化学研究における情報管理および設計支援システムの開発」

【主な研究】・ケモインフォマティクス利用による、分子・薬物設計、材料設計（プロセス条件も含む）、構造解析、合成経路設計、化学プラントなどを対象とした監視と制御のためのソフトセンサー開発

【プロフィール】「何を作るか、それをどのように作るか、そのものは確かにできたか」と言う広い意味での分子設計トータルシステムの研究開発を長年手がけてきた。このために必要な情報化学的手法の研究や計算化学との連携、化学情報の体系的な利用法について研究を展開している。また、化学工学・プロセスシステム工学における、ソフトセンサー研究を通してプロセスの監視と制御へのケモインフォマティクスの展開も進めている。

開催日時	2021 年 1 月 15 日 (金) 12:30～16:30	<p>※本セミナーは、当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。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。</p> <p>詳細は裏面をご覧ください。</p> <p>★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。</p>
受講料	<p>42,000 円 (＋税) ※ 資料付</p> <p>* メルマガ登録者は 33,000 円 (＋税)</p> <p>* アカデミック価格は 24,000 円 (＋税)</p>	

*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】2名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、**2名目は無料、3名目以降はメルマガ価格の半額**です。

★【セミナー参加対象者】・マテリアルズインフォマティクスなど、インフォマティクスに興味のある研究開発企画、技術企画、新事業企画などの担当者 (化学や材料系で研究系・技術系)・マテリアルズインフォマティクスなど、インフォマティクスに興味のある研究者・技術者 (特に化学や材料系)・特に、インフォマティクスに興味があるが、数式は苦手と感じている方

【本ウェビナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- インフォマティクスとは何か
 - 1.1 インフォマティクスの概要
 - 1.2 バイオインフォマティクス
 - 1.3 ケモインフォマティクス
 - 1.4 マテリアルズインフォマティクス
- データ解析の基礎
 - 2.1 データ解析の基礎
 - 2.2 扱うデータの特性把握
- インフォマティクスとは
 - 3.1 データのモデル化
 - 3.2 モデルの逆解析
- 分子設計の事例紹介
 5. 有機材料の設計 (ポリマーアロイ) の事例紹介
 6. 触媒設計の事例紹介
 7. (マテリアルズ) インフォマティクスを実践するには何が必要か
 - 7.1 データベース
 - 7.2 ソフトウェア
 - 7.3 化学・材料と AI の両方の知識と経験?
 8. 少ない実験データ・少ない実験回数での目的物性実現の方法
 9. ソフトセンサー
 10. プロセスインフォマティクス
 11. 自動化化学の展開
 12. 今後の展望と課題、海外の動向

弊社記入欄		ウェビナー申込書	
セミナー名	データ駆動型化学の展開 ～インフォマティクスの基礎と材料設計への応用～		
所定の事項にご記入下さい	会社名 (団体名)	TEL :	
メルマガ会員、登録希望の場合は○	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 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おりません。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 TEL03-3293-7053

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

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

2021年1月15日（金）開催

データ駆動型化学の展開 ～インフォマティクスの基礎と材料設計への応用～

講師：船津 公人氏

東京大学 工学系研究科化学システム工学専攻 教授

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>

【お申し込み後の流れ】

- 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](#)

- 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、画像や音声が悪くなる場合があります。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外部者の退出あるいはセミナーを終了いたします。