

東京大学教員による 最先端工学講座シリーズ 3

趣 旨

現代社会においては最先端技術開発はもとより俯瞰的な視点からのアプローチも必要となってきます。技術者に対するリカレント教育の要請に応えるため、最先端工学講座シリーズを企画いたしました。第3弾として、急速な進化を遂げる化学分野でのコンピュータ利用技術の総説をお届けいたします。積極的なご参加をお待ちしています。

講 義 題 目

デーマ 「データ駆動型化学の新展開」

講 師

東京大学大学院工学系研究科 船津 公人教授

講義会場 & 日時 & 時間

- ・講義会場 東京大学工学部 本郷キャンパス
- ・2019年 2月28日(木) (1日目) 10:00~16:15 講義
16:15~17:00 質疑
- 2019年 3月 6日(水) (2日目) 10:00~16:15 講義
16:15~17:00 質疑
17:15~19:00 懇談会

受講料 及び 受講申込

- ・受講料 200,000円/人(税抜)
- ・定員 20名
- ・受講申込方法 添付の申込用紙にてメールでお申し込みください。
尚、お申込人数は1社複数名可能ですが、定員なり次第締め切りとさせていただきます。

申込先 (一財) 総合研究奨励会 企画室最先端工学講座シリーズ係
〒113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16
TEL 03-5841-7661
メールアドレス erflecture@sogo.t.u.tokyo.ac.jp

最先端工学講座 「データ駆動型化学の新展開」講義内容

講義概要

1. 材料・デバイス系ものづくりにおけるイノベーション
2. ケモインフォマティクスとは
 - 1) データのモデル化法について
 - 2) モデルの逆解析について
 - 3) データ解析の基礎
扱うデータの特徴を把握する
 - (1) 主成分分析
 - (2) 回帰分析の基礎
 - (3) デモを含めた紹介。
3. 分子設計の事例紹介
 - 1) 医薬品分子設計
 - a) 化学空間の可視化による構造探索
 - b) タンパクと化合物の相互作用空間の可視化と構造探索
4. ポリマーアロイを題材とした有機材料の設計
 - 1) 輝度向上性フィルムの成分組成とプロセス条件の最適化
 - 2) PP を主体として輸液用パックの開発
(デモを含めた紹介)
 - 3) 共重合ポリマーの設計
構造の記述子化について
5. 触媒設計についての事例紹介
6. ケモインフォマティクスを進めるにあたっての環境、データフォーマット、ツールについて
7. 少ない実験データから出発して少ない実験回数で目的物性を実現させるには
8. ソフトセンサー
 - 1) 化学プラントの監視のためのソフトセンサー
 - a) ソフトセンサーの構築法
 - b) ソフトセンサーの劣化
 - c) 適応型ソフトセンサーの開発
 - 2) ソフトセンサーを用いた制御
9. プロセス・インフォマティクス
材料設計・プロセス設計・品質管理と制御の連動

講義会場

講義場所 ; 東京大学工学部 本郷キャンパス内

参加にあたっての注意事項

- ・講義中の録音、撮影等は禁止します。又携帯はマナーモードを厳守してください。