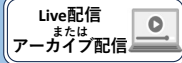


AIによる物性推算

-限界要因とその克服法/今後の展開-



- 日時：2026年5月28日(木) 10:30~16:30
- 聴講料：1名につき 55,000円（消費税込、資料付）
- 会場：Zoomを使用したLive配信セミナーです。 [1社2名以上同時申込の場合のみ1名につき49,500円（税込）]
※アーカイブ配信は6/8~6/18に実施 [大学、公的機関、医療機関の方には割引制度(アカデミック価格)があります。]

講師：埼玉大学 工学部 応用化学科 准教授 博士(工学) 松川 博亮 氏

近年、機械学習を活用した物性推算は、分子設計・プロセス最適化の加速ツールとして注目を集めている。しかし、化学工学分野特有のデータ希少性、物理法則の厳密性、外挿予測の困難さから、純粋データ駆動アプローチの適用限界が指摘されてきた。

本講座では、まずこれらの限界要因を体系的に整理した上で、Physics-Informed Neural Network (PINN) や従来の物性推算式・熱力学モデルとのハイブリッド手法により、これらの課題を克服・超越するアプローチを紹介する。さらに、グラフ畳み込みネットワーク (GCN) による分子構造表現、SMILES文字列をシーケンスとして扱うTransformerベースモデルがもたらすAI独自の強みを活かした最新の物性予測手法を概観する。

さらに、Explainable AI (XAI) によるモデル信頼性向上、AIを前提とした自動物性測定システム、プラントビッグデータとラボデータのマルチフィデリティ学習といった展望を議論し、AI×物性推算の持続的発展に向けた方向性を提示する。

1. 導入

- 1-1. 化学工学における物性推算の位置づけと従来手法の限界
- 1-2. AI・機械学習の基本と物性推算への適用可能性
- 1-3. 「AIは物性推算に向いていない」と言われる主な理由

2. それでも広がるAI物性推算の現実

- 2-1. 新規化合物に対する物性予測モデル
- 2-2. 未測定条件での物性予測モデル

3. AIを活用した物性推算

- 3-1. Physics-Informedニューラルネットワーク
- 3-2. 従来物性推算式・熱力学モデルとの融合

4. AIアーキテクチャがもたらす「従来では不可能だった」物性推算

- 4-1. 分子・結晶グラフを扱うGCN/GNN
- 4-2. 空間情報・局所構造を捉えるCNN
- 4-3. SMILESをテキストシーケンスとして扱うTransformer

5. AI×物性推算の今後と展望

- 5-1. XAIによる予測の解釈性向上と理論的信頼性強化
- 5-2. AI前提の自動実験システム
- 5-3. プラントビッグデータとラボスケールデータの統合

【質疑応答】

「物性推算」セミナー申込書

(Live配信/アーカイブ配信 下記のいずれかに☑を入れてください)

- Live配信 (No.605216) 開催日 : 5/28
- アーカイブ配信 (No.606262) 配信期間 : 6/8~6/18

- ・申込書に必要な事項をご記入の上、FAX (03-5436-7745) にてお申込みください。
- ・ホームページからも申込できます。 <https://www.gijutu.co.jp/>

会社名	事業所・事業部		
住所	〒		
TEL	携帯電話		
	所属部課	氏名(フリガナ)	E-mail
受講者1			
受講者2			
今後ご希望しない案内方法に×印をしてください(現在案内が届いている方も再度ご指示ください) [郵送(宅配便)・ショートメッセージ(携帯電話)・e-mail]			
個人情報の利用目的			
・セミナーの受付、事務処理、アフターサービスのため		・今後の新商品、新サービスに関するご案内のため	
・セミナー開催、運営のため講師へもお知らせいたします			



TECHNICAL INFORMATION INSTITUTE CO.,LTD.

申込専用FAX 03-5436-7745

●申込方法

1. 申込書が届き次第、請求書・聴講券・会場案内図をお送りいたします。
2. お申し込み後はキャンセルできません。
受講料は返金いたしませんので、ご都合の悪い場合は代理の方がご出席ください。

3. 申込み人数が開催人数に満たない場合等、状況により中止させて頂く場合がございます。
4. 定員になり次第、申込みは締切となります。