★「マテリアルズインフォマティクス」と「スペクトルインフォマティクス」の違いとは？
★実験回数の削減や材料合成の効率化に，スペクトル解析をどう活用するのか？
★AIによる計測条件の最適化と機械学習によるデータ解析との違いとは？
★測定装置や測定条件の違いによるデータのばらつきにどう対応するのか？

セミナーNo.701204

Live配信セミナー

～ラマン分光，ＩＲ，ＮＭＲ，ＭＳ，ＸＲＤなど～

スペクトルインフォマティクスの

基本的な考え方，解析の効率化，研究迅速化への活用法

●日　時：2027年1月15日(金) 9:50～17:10
●会　場：Zoomを使用したLive配信セミナーです。
　　勤務先やご自宅のパソコンでご視聴下さい。

●聴講料：1名につき66,000円（税込，資料付）
　　[1社2名以上同時申込の場合にのみ1名につき60,500円(税込)]
　　[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]

1. スペクトルインフォマティクスの考え方，基本について 【9:50～11:20】

横浜国立大学 工学研究院 准教授 博士(工学) 五東 弘昭 氏

1. スペクトル分析と逆解析の概要
 1.1 スペクトルインフォマティクスの基本的な考え方
 1.2 化学構造からスペクトルを予測する順解析
 1.3 スペクトルから化学構造を推定する逆解析

2. IRスペクトルの原理と予測
 2.1 IRスペクトルの基本原理と分子振動
 2.2 IRスペクトルに影響する分子構造と物理化学的要因
 2.3 分子記述子と機械学習を用いたIRスペクトルの予測

3. NMRスペクトルの原理と予測
 3.1 NMRスペクトルの基本原理と化学シフト
 3.2 1H・13C NMRおよび二次元NMRの概要
 3.3 加算則・データベース・HOSEコードによるNMR予測
 3.4 機械学習を用いたNMR化学シフトの予測

4. スペクトル情報からの化学構造の逆解析
 4.1 スペクトルから化学構造を決定する際の課題
 4.2 スペクトル情報に基づく部分構造の抽出と候補構造の生成
 4.3 NMR予測値と実測値の比較による候補構造の評価　【質疑応答】

2. 材料スペクトルデータからの情報抽出と高速自動フィッティング 【11:30～13:00】

東京科学大学 総合研究院 准教授 博士(理学) 安藤 康伸 氏

1. マテリアルズ・インフォマティクス概要
 1.1 機械学習応用の流れと課題設定の重要性
 1.2 物質・材料データの特徴と注意点
 1.3 情報科学市民権

2. スペクトルデータの低次元化とクラスター解析
 2.2 高次元データとしてのスペクトルと低次元化の重要性
 2.2 分類：教師あり学習と教師なし学習
 2.3 特徴空間と類似度
 2.4 主成分解析によるスペクトルの低次元化
 2.5 k-means法によるスペクトルの分類
 2.6 階層的クラスタリングによるスペクトルの分類

3. スペクトル解析のためのEMアルゴリズムによるピーク検知
 3.1 ピーク検知のための処理フロー
 3.2 非線形最小二乗法の困難
 3.3 回帰と分布推定の違い
 3.4 EMアルゴリズムによる最尤推定
 3.5 スペクトル解析のための改良EMアルゴリズム
 3.6 解析事例　【質疑応答】

3. スペクトルインフォマティクスのための機械学習 【14:00～15:30】

東海大学 情報通信学部 教授 博士(情報科学) 今村 誠 氏

1. スペクトルインフォマティクスとは
 — 分光計測と情報科学の融合，その応用分野

2. スペクトルから何がわかるか
 — 計測と逆問題，識別可能性とその限界

3. スペクトル解析の基礎技術
 — 前処理・多変量解析・成分分離

4. 最近のAI研究はスペクトル解析をどう変えたか
 — 深層学習・分子構造予測・生成モデル

5. 実用化に向けた機械学習の課題と技術
 — 少量データ・装置間差・物理知識の活用

6. 機械学習による計測条件の最適化
 — 波長選択・最適実験計画・能動計測

7. まとめ　【質疑応答】

4. 「計測インフォマティクス」の現在と未来：AIが自律的に無駄を省く計測とは何か 【15:40～17:10】

北海道大学 電子科学研究所 教授 博士(理学) 小松崎 民樹 氏

1. ラマン分光イメージングの従来技術の課題
 1.1 ラマン分光法の原理と細胞・組織の化学情報の可視化
 1.2 従来の点スキャン・ラインスキャン方式と計測時間の問題
 1.3 計測とAI解析の分離からAIが計測過程に介入する新しい計測概念へ
2. 強化学習による計測条件の自律的最適化
 2.1 強化学習と多腕バンディット問題の基本的な考え方
 2.2 探索と知識利用のトレードオフと計測点の逐次選択
 2.3 信頼区間に基づく意思決定と閾値判定問題
 2.4 UCB・トンプソンサンプリングによる計測位置・照明パターンの最適化
3. 診断精度を数学的に保証する迅速ラマン計測
 3.1 最大許容誤診断率 δ の設定と精度保証の数学的原理
 3.2 ラマン画像の小区画分割とがん・非がん判定
 3.3 診断精度と計測時間のトレードオフの克服
4. オンザフライ・ラマン顕微鏡の開発と実証事例
 4.1 空間光変調器(SLM)を用いたプログラマブル照明ラマン顕微鏡
 4.2 計測・AI解析・照明制御を統合したフィードバックシステム
 4.3 甲状腺がん細胞・正常細胞の迅速判定と従来法との比較
 4.4 高分子微粒子モデル試料による自律計測の実証
5. 計測介入型AIによる迅速ラマン計測の産業応用と今後の展望
【質疑応答】

技術情報協会
TECHNICAL INFORMATION INSTITUTE CO.,LTD.
申込専用FAX 03-5436-7745

●申し込み方法
1. 申込書が届き次第、請求書をE-mailでお送りいたします。
2. お申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、代理の方のご出席をお願いいたします。

「スペクトルインフォマティクス」セミナー申込書

□ Live配信（No.701204）　　開催日：1／15

申込書に必要事項をご記入の上，FAX（03-5436-7745）にてお申込ください。

・ホームページからもお申込みできます。https://www.gijutu.co.jp

会社名		事業所・事業部	
住所	〒		
TEL		携帯番号	
	所属部・課	氏名（フリガナ）	E-mail
受講者１			
受講者２			

今後ご希望されない案内方法に ×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）

[　郵便（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