

chemistry × informatics

ケモインフォマティクス

オンライン講習会

2026年

9/7(月) 9(水) 11(金) 14(月)

全4回

対象

社会人 (学部3年次以上向け)

企業や公的機関で研究開発に従事する方
大学や高専に所属する教員 ほか

大学生 / 大学院生

必須スキル:

Pythonによるプログラミング経験を有すること

化学とデータサイエンスの世界をつなぐケモインフォマティクスの知識とスキルを体系的に身につけられます。
初めてケモインフォマティクスに触れる方から、実務や研究に活かしたい方まで、幅広くおすすめの内容です。

プログラム

オンデマンドでも学習できる教材を配布しますので、一部の回のみ参加も可能です。

	13:00 ~ 14:30	14:40 ~ 16:10
9/7(月)	イントロダクション	化合物の表現方法
9/9(水)	データベースとデータセット	回帰モデルの構築
9/11(金)	分類モデルの構築	深層学習モデルの構築
9/14(月)	様々な深層学習モデル	逆解析とベイズ最適化

講師 五十幡 康弘 准教授 (豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター)

参加費

社会人: 98,000円

大学・公的機関所属の方: 65,000円

申込方法

参加をご希望の方は、下記QRコードより
申込フォームへアクセスしてください。

申込〆日

2026年8月31日(月)



※最小催行人数に満たない場合、中止することがあります。

ケモインフォマティクス 演習教材

ケモインフォマティクス（化学情報学）とは、化学構造や物性、反応などのデータを活用し、分子設計や物性の関係解析、計算機によるスクリーニング、活性・物性予測モデルの構築などを行う学問分野です。

化学データの収集・管理・分析・可視化を通じて知見を得る、化学と情報科学が融合した領域として位置づけられます。対象は化学物質全般にわたるため、化学や薬学、材料科学に加え、環境科学や生命科学など幅広い分野で応用が進んでいます。近年は機械学習との連携や大規模データベースの利用が進み、情報科学・データ科学分野からも注目されています。

豊橋技術科学大学は、ケモインフォマティクスの電子教材を（株）システム計画研究所と共同で開発しました。

Google Colaboratoryで実行するノートブックと講義動画を用いたオンデマンド学習環境により、自学自習でケモインフォマティクスに関する知識やスキルを習得することができます。

必須スキル	Pythonによるプログラミング経験を有すること
習得目標	ケモインフォマティクスについての基本的な知識を身につける。 RDKitを活用した分子の扱い方および機械学習による物性予測の方法を習得する。

教材内容（全16回）

- | | |
|------------------|------------------|
| 1. イントロダクション | 9. 分類モデルの構築 |
| 2. 化合物の表現方法（1） | 10. クラスタリングと次元削減 |
| 3. 化合物の表現方法（2） | 11. 深層学習の基礎（1） |
| 4. 機械学習の基礎 | 12. 深層学習の基礎（2） |
| 5. データベースとデータセット | 13. 深層学習モデルの構築 |
| 6. 分子記述子 | 14. 深層学習モデルの最適化 |
| 7. 回帰モデルの構築 | 15. 様々な深層学習モデル |
| 8. 回帰モデルの最適化 | 16. 逆解析とベイズ最適化 |

著者

五十幡 康弘

国立大学法人 豊橋技術科学大学 准教授
情報メディア基盤センター所属

後藤 仁志

国立大学法人 豊橋技術科学大学 教授
情報メディア基盤センター所属
公益社団法人日本化学会 ケモインフォマティクス部会 部会長

株式会社システム計画研究所

お問い合わせ

一般社団法人 技科大テックブリッジ

E-mail: gtb@tecbridge.or.jp

