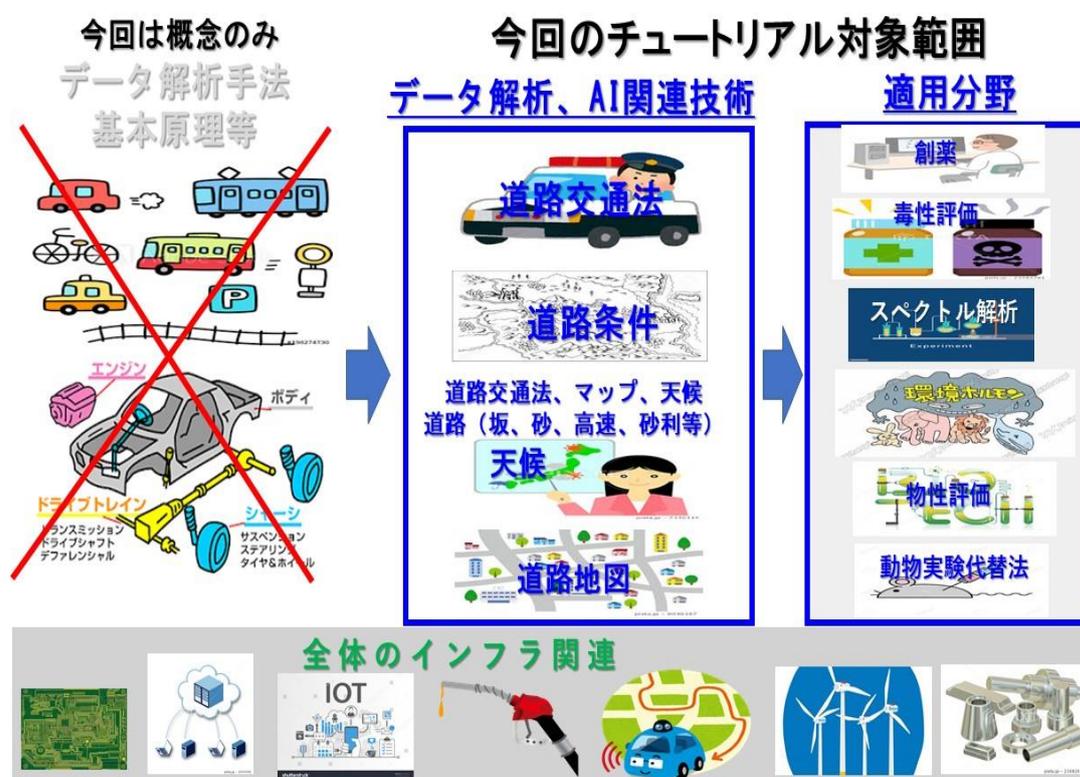


■ チュートリアル TS-02

化学データサイエンスや人工知能に関して興味を持ち、自分の研究に適用しようとされる方々で、データサイエンスや人工知能分野での実績や経験を持たない方々を対象といたします。

また、データサイエンスや人工知能の専門家の方々は、化学という分野にそれぞれの技術を適用する時に留意しなければならない、化学分野の特殊性について学ぶことが出来るように配慮致します。



化学分野でのデータサイエンスや人工知能の適用には、単なるデータサイエンスや人工知能の基礎理論を知るよりも、化学分野の特殊性を考慮しての適用が重要です。これを知らなければ、データサイエンスや人工知能の成果を出せないどころか、間違った結論に振り回されることになります。今回のチュートリアルは、このような間違いを起こさないことに必要な項目について解説し、同時に化学データサイエンスや人工知能の適用事例を多数取り上げ、基本や概要をつかめるようにまとめます。

講義内容は以下の内容とタイムスケジュールで用意いたしますが、当日の様々な状況にて以下の内容や、進行時間等に変化がありますので、ご注意ください。

■講義スケジュール

イントロ：本講習会開催のねらいと全体概要

序章 13:00～13:20

- ・自己紹介
- ・時代の流れと、研究環境および研究内容や研究スタイルの変化

第一章 13:20～13:40 (10分休憩)

化学データサイエンスおよび人工知能の適用イメージ

第二章 13:50～15:00 (10分休憩)

化学データサイエンスおよび人工知能の適用事例：様々なアプローチが可能

第三章 15:10～15:50 (10分休憩)

化学データサイエンスおよび人工知能の適用手順やパターン

第四章 16:00～16:50

化学データサイエンスおよび人工知能の適用上での留意事項

- ①化学分野の留意点
- ②データサイエンス実施上での留意点

まとめと提案 16:50～17:00

- ①化学データサイエンスおよび人工知能のまとめ
- ②今後の展開についての「**オートノマス創薬**」の提案
 - ・KY法の展開（クラス分類と重回帰型）
- ③自由討論

講義内容は時代の環境の変化と当該分野の進歩に従って大きく変化致します。

現在の化学データサイエンスや人工知能に関する講義は、データサイエンスや人工知能の原理や詳細を学ぶというよりは、これらの新たな技術を化学分野の研究に適用するにあたっての様々な留意事項が主体となります。

先のページの自動車を例にとったイラストのように、現在は自動車を作る技術は殆ど必要ありません。むしろ、化学分野適用にあたっての化学分野特有の事項を理解しつつ、正しい研究解析を実施できる基礎知識を身に着けることが成功の第一歩となります。