

半日で知る、化学分野のデータサイエンスおよび人工知能概要：
「FS-08:化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」立ち上げ会協賛
A Half-day Overview of Data Science and Artificial Intelligence in the Field of Chemistry:
"FS-08: Chemical Data Science and Artificial Intelligence Discussion, Work Shop"
Kick-off Meeting Sponsorship

モデレーター：湯田 浩太郎 Kohtaro Yuta (株式会社インシリコデータ In Silico Data, Ltd)

化合物分野で最近頻繁に聞かれる言葉として、**薬物デザイン**、**仮想スクリーニング**、**ドラグリポジショニング**、**毒性予測/評価**、**機能性化合物デザイン**等の言葉(手法)がある。更には**動物実験代替法**研究分野での展開も急速に進行している。これらの手法はインシリコ(コンピューター)上で展開される研究である。これら手法の実施基本技術として**データサイエンス**や**人工知能**が展開されてきた。また、これらの基本技術はバイオや医療分野でも中核技術となる。関連で、DB、ネットワーク、クラウド等も関与してくる。

今後、5年、10年先まで同じ研究手法を継続できる保証はない。研究の大きな流れは、研究分野の異なる研究者との**分野間連携・融合**や**学際研究**となっている。このような将来の研究発展や変化に寄与できる可能性を有する**データサイエンス**や**人工知能**を武器と出来れば心強い。さらには、自分の研究に付加価値を付けることも可能となる。

◆参加していただきたい方々：データサイエンスや人工知能の素人の方、及び専門の方

1. WET研究者であるが、インシリコ関連技術を自分の研究に適用したい、あるいは興味を持っている研究者。従って、インシリコ関連技術に関しては初心者となる。
2. データサイエンスや人工知能の専門研究者であるが、アプリに関する知識が無い。即ち、化学分野の基礎知識が無く、化学分野への展開が出来ない意味での初心者。

◆今回のチュートリアル内容の基本方針：化学研究分野での適用技術中心の解説

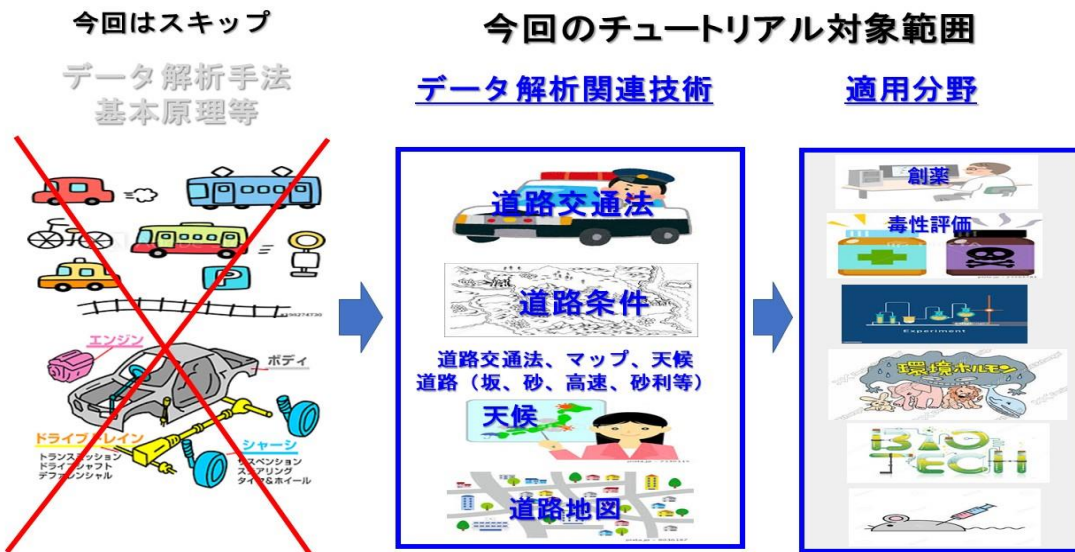
本チュートリアルは、研究を実施する観点で全体を俯瞰できるようにすることである。即ち、自分の研究にデータサイエンスや人工知能を適用する適用技術中心に説明する。

実際にデータサイエンスや人工知能を適用するのに必要な内容、即ち、①適用時の全体およびデータの流れ、②個々の手法の役割や適用限界、③化合物情報をコンピュータで扱うためのアナログ情報からデジタル情報への変換技術、④数値データの扱い方、⑤サンプル収集の留意点、⑥データ解析結果の評価法等の実施適用技術を中心に全体を説明する。

◆今回のチュートリアルの達成目標：

- ・化学分野のデータサイエンスや人工知能の全体概要を知る。
- ・WET及びDRY研究者間のコミュニケーションが取れて、共同研究を進められること。
- ・将来の研究の変化に追従できるように化学データサイエンスおよび人工知能を知る。

化学関連研究の達成を、車で移動することに例えたイメージ図



今回のチュートリアルでの討論内容概略

