TS03

日時： 2025 年 10 月 27 日 13:00-17:00
場所： ４Ｆ 407

KNIMEを使ったケモインフォマティクス入門

Introduction to Chemoinformatics Using KNIME

本チュートリアルでは、医薬品データを題材に、ワークフロー構築型ツール「KNIME」の基本操作から簡単な機械学習モデルの作成までを体験します。はじめに、CSVファイルから化合物の活性データを読み込み、前処理（欠損値処理、特徴量選択、正規化）を行います。続いて、ロジスティック回帰モデルとランダムフォレストモデルを用いて、活性分類を実施します。ハイパーパラメータチューニングを行い、モデル精度を向上させるプロセスも紹介します。操作はすべてノーコードで進めるため、初心者でも直感的にデータ解析の流れを理解できる内容とします。最終的には、参加者が自ら簡単なワークフローを構築し、評価指標を確認できることを目標としています。

モデレーター： **江崎 剛史**（滋賀大学）、**植沢 芳広**（明治薬科大学）

- **参加費：** 無料
- **申込〆切：** 9月30日
- **定員：** 30名