

## 化学データサイエンスや人工知能関連研究発表 Chemical data science and artificial intelligence related research

### 開催趣旨:

本フォーカストセッションは「計算毒性学研究会」に、昨年新たに設定された「化学データサイエンスおよび人工知能討論、勉強会」が主催致します。

最近のIT関連技術の発展はビッグデータ時代を実現し、このビッグデータを利用するデータサイエンスや人工知能技術の急速な発展や展開を導き出しております。このようなデータサイエンスや人工知能を現実の世界(創薬、医療、バイオ、環境、食品、化成品、他)に適用するには様々な問題や限界事項を理解してこれらの問題をクリアすることが求められます。

・個々の適用分野特有の問題、・データサイエンスの手法上での問題、・人工知能適用上での問題、・複数データベース間の問題、・その他の問題、等の様々な問題です。これらを理解せずに、データサイエンスや人工知能を適用すれば、予測できない深い泥沼にはまります。

今回は、医療関連データの数値化問題と、製薬企業におけるIT関連インフラの整備、そして来るべき「オートノマス(自律型)化学研究」時代の到来とその概要を議論致します。

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.)  
**植沢芳広 (Yoshihiro Uesawa)**  
明治薬科大学 (Meiji Pharmaceutical University)

### 1. 化合物作用の包括的理解に向けた数値化研究—病理画像の数値化

**水野 忠快 (Tadahaya Mizuno)**  
東京大学 (Tokyo University)

医薬品の予期せぬ副作用など、化合物の作用は必ずしも人の認識の範疇に収まらず、包括に評価するためには人の認識外の情報も捉えた作用の表現が求められる。オミクス解析など、化合物を処理した対象を網羅的かつ恣意性なく数値化する、表現型に着目した方法論が一般的である。本講演では、医薬品などの安全性試験効率化を志向した病理画像の網羅的かつ恣意性のない数値化を中心に、我々のこれまでの取り組みについて紹介する。

### 2. 塩野義製薬におけるデータサイエンス部の取り組みとデータ活用基盤

**小野塚 昭**  
塩野義製薬株式会社 データサイエンス部

塩野義のデータサイエンティストは、各バリューチェーンとの交流の機会が増え、様々なデータに基づいた課題設定と解決を加速しています。データサイエンティストに求められる能力については、課題設定能力、解析計画をデザインする能力に加えて、各機能のメンバーと協力していくリーダーシップスキルも必要です。本発表では、「バリューチェーン横断型データ活用プロジェクト」を取り上げ、データサイエンティストに求められるリーダーシップスキルを紹介し、データ活用基盤の概要を交えながら、データ利活用を如何に推進していくべきかを議論したいと思います。

### 3. 化学研究の「自動化」時代から、「自律型(オートノマス)」時代への進化と対応

**湯田 浩太郎 (Kohtaro Yuta)**  
株式会社インシリコデータ (In Silico Data, Ltd.)

研究技術の変遷は「手動⇒機械化⇒自動化」と発展してきており、現在は様々な分野で自動化研究が進んでいます。これらの進歩の背景には様々な技術の発展があり、機械化には様々な機械の開発と動力の利用があり、自動化にはコンピュータ関連の発達が大きく貢献しています。現在の状況を見ると、コンピュータ関連のIT環境が急速に拡大普及し、ITインフラが革命的に発展しております。ビッグデータやデータサイエンスそして人工知能の急速な展開が日々進行しており、近未来にはこのような最新のIT技術を適用した新たな技術的な発展がきます。即ち、「オートノマス(自律型)化学研究」が近未来に実現します。

今回の講演では、オートノマス(自律型)化学研究の提案と、自動化との違いやその基本を議論致します。