## ☆ Pvthonでここまでできる! 実験計画・条件最適化の効率化とAI活用

一 分散分析、応答曲面法からベイズ最適化まで、実験にかかる時間をコストを削減



Live配信 アーカイブ配信

# Pythonemut 実験計画法と

## その最適化

- ●日 時:2026年1月15日(木) 13:00~17:00
- ●会 場:Zoomを使用したLive配信 ※アーカイブ配信は1/26~2/5に実施
- ●聴講料:1名につき 49,500円(消費税込、資料付)

〔1社2名以上同時申込の場合のみ1名につき44,000円(税込)〕 〔大学、公的機関、医療機関の方には割引制度(アカデミック価格)があります。〕

●講師:滋賀大学 データサイエンス学部 准教授 江崎 剛史 氏

【講座主旨】化学・創薬科学分野の研究開発には、膨大な 費用と時間が必要とされるため、効率的に進めるべく変革 が求められています。そのためには、化学分野のデータに 機械学習をはじめとした情報学の手法を適用するケモイン フォマティクスが注目されています。これにより、特性の 予測や有望な条件の探索ができれば、膨大な時間や費用を 削減しながら、新しい物質の開発に向けたヒントを得るこ とが期待されています。

本セミナーでは、より有効な実験条件を効率的に探索す るための基本的な統計手法として、まず分散分析について 解説します。それから、近年注目されているベイズ最適化 を用いた実験計画について講義を行います。そして、複数 特性に対して最適化を目指す方法についても、概要を紹介 します。

実際に業務で化合物の特性を予測できることを目指して デモンストレーションを行います。デモンストレーション はGoogle Colaboratoryを使い、本セミナーで使用したコード とデータの例は配布いたします。

### 【講座内容】

- 1. 化学分野におけるデータ活用
- 2. 実験計画における考え方
- 3. 分散分析
- 4. 最適な実験条件の探索
- 5. 線形モデル
- 6. 応答局面法
- 7. ガウス課程同帰モデル
- 8. ベイズ最適化
- 9. デモンストレーション: ガウス課程回帰
- 10. 多目的最適化
- 11. デモンストレーション: 多目的最適化

【質疑応答】

### ◆◆講師プロフィール◆◆◆

専門分野:ケモインフォマティクス、バイオインフォマティクス

学位:博士(理学)

### 略歴・活動など:

理化学研究所、医薬基盤・健康・栄養研究所を経て現職。データから医薬品候補を探索する手法の開発を目指した研究、 データサイエンス教育に従事。

・『まるっと解説 Python×ケモインフォマティクス データ収集から予測・生成まで』、科学情報出版、江崎 剛史、池田 和由、清水 祐吾 『ケモインフォマティクスにおけるデータ収集の最適化と解析手法』,技術情報協会,

●申认方法

- 担当執筆分:第2章5節「「線形回帰分析」と「非線形回帰分析」によるデータ解析での留意点」pp.10-20,江崎 剛史
- ・『Pythonではじめる異常検知入門 ―基礎から実践まで―』、科学情報出版、江崎 剛史、李 鍾替(編: 笛田 薫)

- 1. 申込書が届き次第、請求書・聴講券・会場案内図をお送りいたします。
- 2. お申し込み後はキャンセルできません。

受講料は返金いたしませんので、ご都合の悪い場合は代理の方がご出席ください。

# 「Python実験計画法」セミナー申込書

(Live配信/アーカイブ配信 下記のいずれかに口を入れてください)

□ Live配信(No.601112) 開催日:1/15

□ アーカイブ配信(No.601164) 配信期間:1/26~2/5

・申込書に必要事項をご記入の上、FAX(03-5436-7745)にてお申込みください。

・ホームページからも申込できます。https://www.gijutu.co.ip/

会社名		事業所・事業部	
住所	₸		
TEL		携帯電話	
	所属部課	氏名(フリガナ)	E-mail
受講者1			
受講者2			
今後ご希望しない案内方法に×印をしてください(現在案内が届いている方も再度ご指示ください)			
[ 郵送(宅配便)・ ショートメッセージ(携帯電話)・e-mail ]			
個人情報の利用目的			
・セミナーの受付、事務処理、アフターサービスのため・今後の新商品、新サービスに関するご案内のため			

- 3. 申込み人数が開催人数に満たない場合等、状況により中止させて頂くことがございます。
- 4. 定員になり次第, 申込みは締切となります

セミナー開催、運営のため講師へもお知らせいたします



申込専用FAX 03-5436-7745