

新年明けましておめでとうございます。

今年もよろしくご支援お願い致します。

昨年は9月初旬に JASIS 展での先端診断イノベーションゾーンでの支援作業や、ランチョンセミナーの開催。10月末には CBI 学会での「計算毒性学研究会」主催による2つのフォーカストセッション主催。12月には動物実験代替法学会での企業展示。また、9月中旬にポルトガルのポルトで開催された EUROTOX2015 へのポスター発表参加等、幾つかのイベントを実施致し、無事完了することが出来ました。これも、皆様の温かいご支援の賜物と、改めましてお礼申し上げます。

今年は、時代が大きく変化しつつあることを感じております。情報関連の基本的環境変化として、ビッグデータや IoT 等のデータベース関連分野での大きな変化が始まりつつあります。この流れを受け、今後の展開の目玉として多変量解析/パターン認識を含めた人工知能関連技術が注目されています。また、情報の化合物関連適用技術としては、IT 創薬や毒性評価が注目されつつあります。

湯田は世界最初のケモメトリックス研究支援システムである ADAPT を Jurs 研で学び、帰国後この ADAPT を富士通の汎用機に移植し、日本で展開しました。化学多変量解析/パターン認識(ケモメトリックス)のシステム展開や、その適用研究(QSAR/QSTR/QSPR 等)支援や実施を現在まで約30年にわたり継続して実施してまいりました。

人工知能関連技術の展開は当初より化学関連分野での展開がメインでした。世界最初の人工知能システムとされる DENDRAL は機器分析データを用いて化合物構造式を推定するものでした。ADAPT は DENDRAL とほぼ同時期に開発され、世界最初の多変量解析/パターン認識による化学データ解析支援システムとなりました。また、有機合成ルート創出支援システムである LHASA もルールベース型人工知能システムとして、同時期(1960年代後半から1970年代前半)に COREY 教授により展開されました。

湯田は1990年代に、京都大学の藤田稔夫教授の発案による、創薬研究者の化合物構造変換ノウハウをルールとした、創薬関連化合物構造変換システム EMIL の立ち上げを行いました。EMIL は構造変換部分に FORTRAN、ルール適用部分に LISP を用いた二つの言語による当時最新のハイブリッドシステムとして展開されました。

現在の人工知能技術は既存のノウハウをルールとして用いる伝統的なルールベース型と、多変量解析／パターン認識によるルール学習／獲得型の二つのアプローチより構成されています。

人工知能の適用分野として様々なものがあります。これらのうち、化合物関連の毒性評価研究分野では、基本原理より適用手法が限定され、多変量解析／パターン認識によるアプローチとルールベース型人工知能による二種類のアプローチが展開されています。

上記二つの基本技術を経験し展開してきたノウハウを用い、同時に湯田が独自に開発した大量データの扱いを特徴とする「KY法」をビッグデータや IoT 等の時代の変化に対応できるように適用することが、今後のインシリコデータの大きなテーマと考えております。

今年も暖かいご支援お願い致します。

以上

2016年元旦

株式会社 インシリコデータ

湯田 浩太郎