

現在の化学系ビッグデータ解析

Materials Informatics

目的変数と説明変数を
ニューラルネットワーク法
などで繋ぐ。

知りたいこと（目的変数）

生物蓄積性
引火性
毒性
薬効性
蓄電性能
その他

水への溶解度
logKow
油脂への溶解性
分解速度定数
反応性指数
?????

本質的な説明変数

スモール・データ

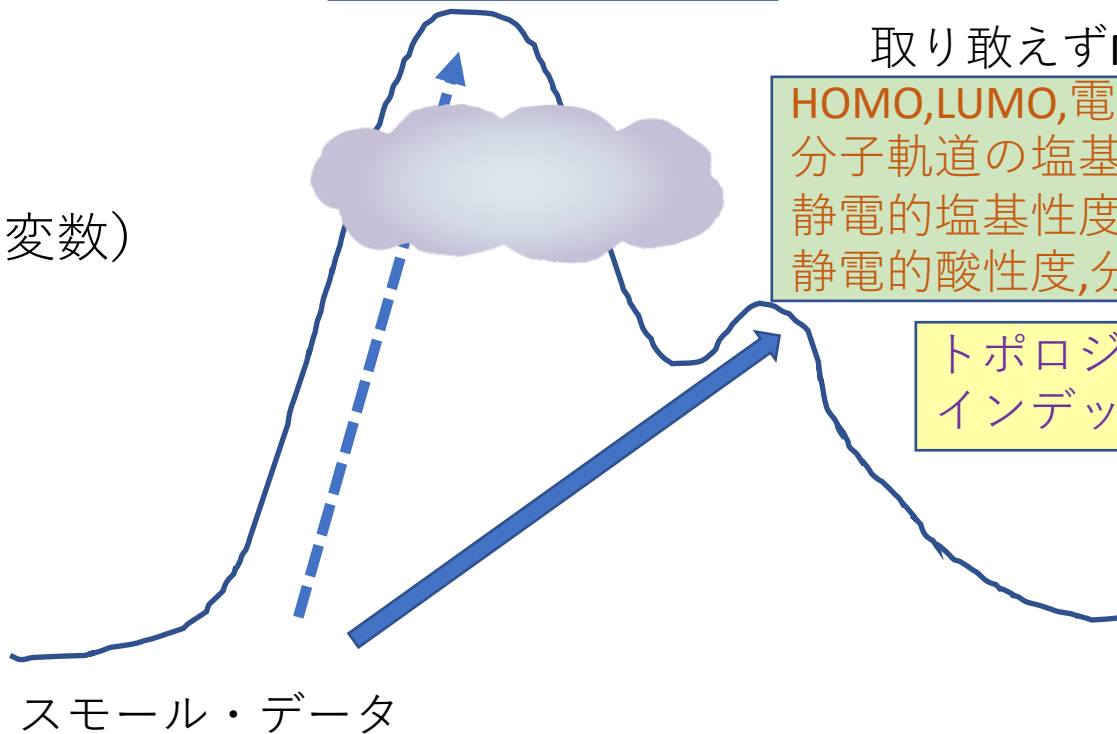
何が本質かもわからない
こともある

説明変数は
ビッグデータ

取り敢えずMO

HOMO,LUMO,電荷
分子軌道の塩基性度
静電的塩基性度
静電的酸性度,分極率指数

トポロジカル
インデックス



スモール・データ