

講義 + Python のハンズオン

- *ケモ-, マテリアルズ-, プロセス-,
インフォマティクス全般
- *Jupyter Notebook の使い方,
Python の基礎
- *基本的なデータの前処理, 可視化,
回帰分析, クラス分類, モデル検証
- *モデルの適用範囲
- *化学構造の扱い
- *実験計画法, 適応的実験計画法,
ガウス過程回帰・ベイズ最適化

金子 弘昌

Python を扱います！

- ✓ Pythonのバージョン
 - 3.x 系 (2.x 系ではありません)
- ✓ 使用する開発環境・パッケージ
 - Anaconda (無料) <https://www.anaconda.com/>
 - 統計・機械学習・科学技術計算などを行うためのモジュール・ツールをまとめてインストール可能
 - ダウンロード
<https://www.anaconda.com/distribution/#download-section>
- ✓ Python プログラミングを行うためのツールとして、
jupyter notebook を使用

- ✓ Anaconda のインストールと jupyter notebook の起動
https://datachemeng.com/anaconda_jupyternotebook_install/
- ✓ 「化学構造の扱い」を利用する方は、RDKit のインストール
https://datachemeng.com/rdkit_install_import/