

登録コード	T1014200	開講年度	2026	市民開放授業			
授業科目	コンピュータ化学演習(16T以降)				担当教員	山田 哲也 他	
英文授業名	Exercises in Computational Chemistry				副担当	岡田 友彦・向田 志保	
単位数	1	講義期間	前期	曜日・時限	水曜・2時限	対象学生	物質化学科2年生
講義室	工W2-101教室		授業形態	演習	遠隔授業科目	備考	
信大コンピテンシー	該当						
(1)授業の達成目標	【授業で得られる「学位授与の方針」要素】				【授業の達成目標】		
	25Tカリ, 23Tカリ						
	【22T～】専門的学力を基礎とし,的確な情報を収集・理解し,これを他の人に発信できる能力が身についている。				・データサイエンスの活用事例を説明できること。 ・確率と統計の様々な概念を説明できること。 ・データの相関について説明できること。 ・データ分析のための手法である回帰分析のアルゴリズムを説明できること。 ・機械学習とAIがどのような技術であるかを説明できること。		
	【22T～】様々な課題を見つけ取り組む力が身についている。				・Excelを使って統計グラフの作成と代表値・統計量の計算ができること。		
(2)授業で学べる「テーマ」	その他						
(3)全学横断特別教育プログラム							
(4)授業の概要	様々な電子データを分析・活用するために統計学、数学、コンピュータ科学にまたがるデータサイエンスを理解する。統計解析用ソフトウェアを活用し、データを可視化したり分析したりすることを学び、機械学習の視点から問題解決方法を導き出す能力を身につける。 向田志保特任教授(株式会社村田製作所),岡田教授と合同で、データエンジニアリングに関する授業をおこなう。すべての授業は、講義と演習を組み合わせで行う。また、講義で勉強したことの理解と定着を促すために演習を行う。 ・演習時は、個人のパソコンを利用しておこなう。 次の2つのソフトを使用する。 Excel Google Colab エクセルは、大学のライセンスを使って事前に自身のPCにインストールしてください。						
(5)授業計画	()内の記号・番号は、数理DS・AI学修項目との対応を示す 第1回 ガイダンス、Excelの基礎 (DS1-3, 5) 第2回 ベクトルと行列の基礎 (DS1-2, 6) 第3回 Python基礎 (DS1-3,4,5) 第4回 マテリアルズ・インフォマティクス 基礎 (AI3-3) 第5回 マテリアルズ・インフォマティクス 基礎 ・機械学習入門(前編) (AI3-3) 第6回 マテリアルズ・インフォマティクス 基礎 ・機械学習入門(後編) (AI3-3) 第7回 マテリアルズ・インフォマティクス 基礎 ・ベイズ最適化による実験計画法 (AI3-3,6) 第8回 ケモインフォマティクス入門 (DE2-2) 第9回 特徴量分析と逆解析 (DE2-5, AI3-6) 第10回 画像認識、自然言語処理 (AI3-5, AI3-7) 第11回 画像認識、自然言語処理 (AI3-5, AI3-7) 第12回 プロセス・インフォマティクス概論、時系列分析(AI3-3) 第13回 AIによる分子生成モデルと合成可能性(AI3-6,9) 第14回 量子コンピュータ概論(AI3-9) 第15回 アジャイル手法を用いた材料開発～スクラム・カンバン・プロジェクトマネジメントの基本 (AI3-9) 第16回 期末テスト 授業アンケートを、第15回に実施する。						
(6)成績評価の方法	期末テスト/レポート : 70 点 各授業時間中の演習・課題提出 受講態度 : 30 点						
(7)成績評価の基準	授業で課せられた内容を理解し,説明できれば「合格水準にある」,応用課題を理解し,説明できれば「やや上にある」,より具体的な考察を求められる課題を理解し,説明できれば「かなり上にある」,推察できるより難解な応用展開を理解し,説明できれば「卓越している」とする。						
(8)事前事後学習の内容	授業時間22.5時間(1.5時間×15回),自習学習時間22.5時間(1.5時間×15回)である。 予め配付した資料を自習学習で理解し、講義に臨むこととする。						
(9)履修上の注意	各自ノートPCを必ず持参のこと。原則として、OSはWindowsであることを必要とする。						
(10)質問,相談への対応	基本的に講義の後,およびオフィスアワーに対応する。 これ以外の時間でもできる限り対応するが,予め担当者にe-mail(yamadat@shinshu-u.ac.jp,*を@に変換)で連絡いただきたい。						
(11)その他	【数理 DS・AI学修項目との対応】(DS1-6) 数学基礎						

【教科書】	指定しない。資料を配付する。
【参考書】	1. 馬場敬之，線形代数キャンパス・ゼミ 改訂9，マセマ出版社，ISBN:978-4866152073 2. 馬場敬之，確率統計キャンパス・ゼミ 改訂7，マセマ出版社，ISBN:978-4866152080