

化学分野における データサイエンスの初步が学べる入門書！

ケモ・マテリアルズ・ インフォマティクス 入門

RとPythonによる基礎と実践

著者：金谷 重彦、蓬萊 尚幸、張

仕様：B5判・並製・印刷版モノクロ/電子版一部カラー・
本文290頁

印刷版・電子版価格：4,100円（税抜）

ISBN（カバー付き単行本）978-4-7649-0747-8 C3043

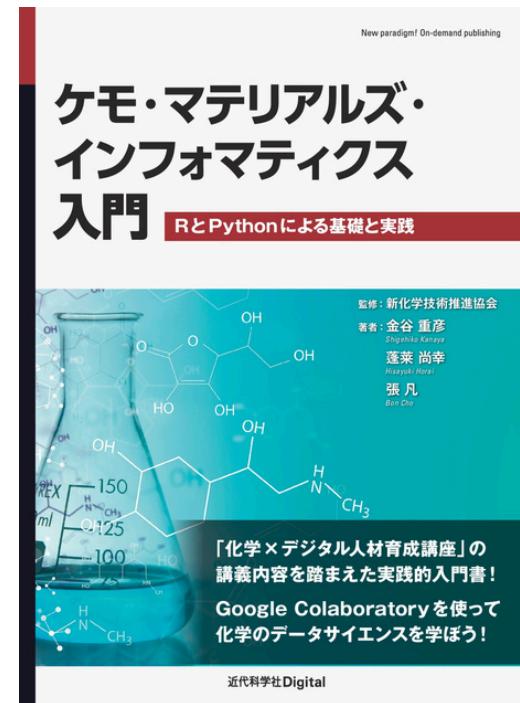
ISBN（POD）978-4-7649-6109-8 C3043

発行：近代科学社 Digital

発売：近代科学社

内容紹介

本書は化学分野におけるデータサイエンスであるケモ・マテリアルズ・インフォマティクスについてを重点的に解説した教科書です。機器スペクトルデータ、化学構造データ、生物活性・物性データなどの多様な化学データを活用し、物質の新規発見や物性予測につなげるインフォマティクス技術を習得することを目標としています。化学産業界が抱えている様々な課題を解決するために、Google Colaboratoryの活用法からPythonの基本文法、RからPythonへのコード書き換えを通じた実践的なプログラミング、RとPythonプログラミングを使ったデータ解析手法と実装までを網羅。新化学技術協会の「化学×デジタル人材育成講座」で扱われた内容をベースにしているため、初学者がチャレンジしやすい一冊です。



近代科学社 Digital

<https://www.kindaikagaku.co.jp/kdd/>

近代科学社Digitalは、株式会社近代科学社が推進する21世紀型の理工系出版レーベルです。デジタルパワーを積極活用することで、オンデマンド型のスピーディで持続可能な出版モデルを提案します。

全国の書店・ネット書店にてお求めいただけます。お取り扱い店は以下のウェブページをご覧ください。

https://www.kindaikagaku.co.jp/book_list/detail/9784764961098/



お問い合わせ先

株式会社近代科学社

〒101-0051 東京都千代田区神田神保町 1-105

神保町三井ビルディング

電子メール：contact@kindaikagaku.co.jp

目次

はじめに

第1章 Python プログラミングとデータハンドリング

- 1.1 本章の学習事項
- 1.2 Google Colabの始め方
- 1.3 Python プログラミングの基礎事項
- 1.4 値の種類と演算子
- 1.5 変数と代入
- 1.6 データ構造と繰返し処理
- 1.7 内包表記と高階関数

第2章 離散型データ(計数データ)の分析

- 2.1 本章の学習事項
- 2.2 離散型データの確率分布
- 2.3 二項分布とそれを利用した検定
- 2.4 超幾何分布とそれを利用した検定
- 2.5 ポアソン分布

第3章 連続型データ(計量データ)の分析

- 3.1 本章の学習事項
- 3.2 正規分布の特性と応用
- 3.3 カイ二乗分布の特性と応用
- 3.4 t分布の特性と応用
- 3.5 t分布を利用した2組のデータの比較
- 3.6 ノンパラメトリック統計検定
- 3.7 分割表を利用した独立性の検定・適合性の検定

第4章 データに潜む類似度・距離の分析

- 4.1 本章の学習事項
- 4.2 ピアソン相関分析
- 4.3 主成分分析
- 4.4 クラスター分析

第5章 データに潜む変数間の関係をモデル化する手法

- 5.1 本章の学習事項
- 5.2 線形重回帰分析
- 5.3 部分最小二乗法(PLS)
- 5.4 正則化を利用した回帰(正則化最小二乗法)

第6章 化学情報処理

- 6.1 本章の学習事項
- 6.2 化学構造の表記法
- 6.3 rcdkパッケージ

第7章 ChatGPTの使い方

- 7.1 ChatGPTとは
- 7.2 ChatGPTの使用方法
- 7.3 ChatGPTを用いたPythonとRの相互書き換え

付録

- A.1 自分のパソコンで RStudio と R をインストールする

参考文献

索引

著者紹介

監修紹介

公益社団法人 新化学技術推進協会

公益社団法人新化学技術推進協会 (JACI) は、社団法人新化学発展協会と一般社団法人化学技術戦略推進機構の戦略推進部及びGSCN (グリーン・サステイナブルケミストリー ネットワーク) を統合して、2011年4月に社団法人として発足した。技術革新の原動力となる新たな化学技術を発展させるため、革新的化学技術の創生や知的技術基盤の整備に貢献する諸事業を推進し、新たな化学技術の普及と利用促進を通じてわが国産業の国際競争力の強化を図り、もって社会の維持的発展及び国民生活の向上に寄与することを目的としている。

多くの事業活動の中で本書に関連した分野としては、先端化学・材料技術部会傘下にコンピュータケミストリ分科会 (CC分科会) を設置し、化学分野における計算機応用を推進している。同分科会は研究者・技術者を育成する場を提供し、以下の3WGが毎月月例会を開催している。

著者紹介

金谷 重彦 (かなや しげひこ)

東京理科大学応用生物科学科卒、豊橋技術科学大学・材料システム工学博士号取得

現在、奈良先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・計算システムズ生物学研究室・教授、東京農業大学総統研究所研究会・食・農データサイエンス部会長、新化学技術推進協会技術顧問

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

著書：『実践R ケモ・マテリアル・データサイエンス』シーエムシー・リサーチ(2010) (共著)、『Rではじめるケモ・マテリアルズ・インフォマティクス』近代科学社 (2022) (共著)

蓬萊 尚幸 (ほうらい ひさゆき)

東京工業大学情報工学科卒、奈良先端科学技術大学院大学・博士(理学)取得

富士通(株)、セレスター・レキシコ・サイエンシズ(株)、ヒューマン・メタボローム・テクノロジー(株)、茨城工業高等専門学校教授を経て、現在、木更津工業高等専門学校情報工学科嘱託教授

専門分野：ソフトウェア工学、情報検索、バイオインフォマティクス、ケモインフォマティクス

著書：『ドラフト標準C++ライブラリ』トッパン(1995) (翻訳[P.J. Plauger著])

張凡 (ちょう ほん)

奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科博士後期課程修了。博士(工学)

奈良先端科学技術大学院大学情報科学領域計算システムズ生物学研究室客員助教