

情報科学概論 Introduction to Information Science

薬：K1-22221MY、生命：K1-22221MS

基礎科目 2年／後期 1.5単位 選択科目

科目責任者 富永 大介(薬学教育研究センター／生命情報科学)

■教育目的

データサイエンスのさまざまな手法と実際のPC操作を学ぶ。基礎的な統計解析法と機械学習法について、基本的な解析の原則と手順を追うことで数値データ解析の実践的技能を身に付ける。またゲノムとたんぱく質の一次および高次構造を視覚的に把握し探索する基礎的手法、およびオープンデータによる創薬分子探索の基礎理論と実践的手法を学ぶ。

【卒業認定・学位授与の方針:YD-2、SD-12345】

■学習到達目標

1. データサイエンスの知識を使って解析を行うための実際のPC操作を身に付ける。(知識・技能)
2. 薬学や生命科学に利用できるオープンデータにはどのようなものがあるかを説明できる。(知識)
3. ゲノム配列の構造とたんぱく質の立体構造を自在に表示し、視覚的に把握できるようになる。(知識・技能)
4. SMILES 表記や薬剤分子探索の原理などケモインフォマティクスの基礎を理解する。(知識)
5. たんぱく質と低分子の相互作用の様子を視覚的に把握できるようになる。(知識・技能)

■準備学習（予習・復習）

予習：「基礎統計学」と並行して理解を進められるように用語を調べておく。分子間相互作用、ゲノム配列の構造、たんぱく質の立体構造について用語の意味や概要を調べておく。(30分以上)

復習：講義で行った課題を条件を変えて再試行してみる。(30分)

■授業形態

双方向型授業（ICT活用）、講義

■授業内容

毎回ノートPCを各自で持参し、実際のPC操作を行いながら演習を中心とした講義を行う。

No.	項目	授業内容	備考・SBOコード
1	データサイエンスとは	データサイエンスとオープンデータの基礎	E3(1) ⑤ 1～6
2	データ解析の基礎 1	度数分布	E3(1) ⑤ 1～6
3	データ解析の基礎 2	散布図と相関係数	E3(1) ⑤ 1～6
4	データ解析の基礎 3	回帰分析	E3(1) ⑤ 1～6
5	データ解析の基礎 4	モデル選択	E3(1) ⑤ 1～6
6	データ解析の基礎 5	クラスタリング	E3(1) ⑤ 1～6
7	機械学習の基礎 1	機械学習とその種類	E3(1) ⑤ 1～6
8	機械学習の基礎 2	各種機械学習法の実際	E3(1) ⑤ 1～6
9	機械学習の基礎 3	機械学習とAI	E3(1) ⑤ 1～6
10	生命科学への応用 1	ゲノム情報およびたんぱく質情報のオープンデータ	C6(2) ④⑤
11	生命科学への応用 2	その可視化および解析のためのPC操作	C6(2) ④⑤
12	薬学への応用 1	化合物データベースと機械学習適用の基礎	C4(2) ③, C4(3) ②③
13	薬学への応用 2	ドッキングシミュレーションの原理	C4(2) ③, C4(3) ②③
14	薬学への応用 3	オープンデータを使った創薬の原理	C4(2) ③, C4(3) ②③
15	薬学への応用 4	オープンデータを使った化合物探索のPC操作	C4(2) ③, C4(3) ②③

■授業分担者

富永大介 (No. 1～9)、杉原稔 (No. 10～11)、広川貴次 (非常勤講師、No. 12～15)

■課題（レポート、試験等）のフィードバック及び成績評価方法

毎回の講義での課題の評価の合計を基に総合的に評価する。

■教科書

講義支援システム(MY-CAST)に用意するPDF形式の授業資料を用いる。

■参考書

「データサイエンス入門」竹村影通 他 編(学術図書出版社)

「Rをはじめよう生命科学のための RStudio 入門」A. P. Beckerman, D. Z. Childs, O. L. Petchey 原著 (羊土社)