

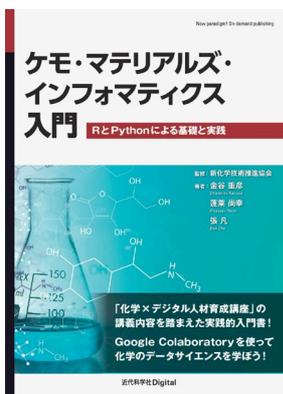
化学分野におけるデータサイエンスの初歩が学べる入門書！  
『ケモ・マテリアルズ・インフォマティクス入門  
RとPythonによる基礎と実践』  
発行

インプレスグループで理工学分野の専門書出版事業を手掛ける株式会社近代科学社は、2025年8月22日に、近代科学社 Digital レーベル(※)より、単行本版『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、蓬莱 尚幸、張 凡)の発売を開始いたしました。



※近代科学社 Digital とは:近代科学社が著者とプロジェクト方式で協業する、デジタルを駆使したオンデマンド型の出版レーベルです。詳細はこちらもご覧ください。

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



●書誌情報

【書名】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、蓬莱 尚幸、張 凡

【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

【印刷版基準価格】4,100円(税抜)

【電子版基準価格】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

【商品URL】[https://www.kindaikagaku.co.jp/book\\_list/detail/9784764961098/](https://www.kindaikagaku.co.jp/book_list/detail/9784764961098/)

●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。

●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RAFT標準 C++ライブラリ』トッパン(1995)(翻訳[P.J.Plauger 著])

張 凡(ちょう ぼん)

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

---

#### ●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 データ構造と繰り返し処理

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

---

**【近代科学社 Digital】** <https://www.kindaikagaku.co.jp/kdd/index.htm>

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。

**【株式会社 近代科学社】** <https://www.kindaikagaku.co.jp/>

株式会社近代科学社 (本社 : 東京都千代田区、代表取締役社長 : 大塚浩昭) は、1959 年創立。

数学・数理科学・情報科学・情報工学を基軸とする学術専門書や、理工学系の大学向け教科書等、理工学専門分野を広くカバーする出版事業を展開しています。自然科学の基礎的な知識に留まらず、その高度な活用が要求される現代のニーズに応えるべく、古典から最新の学際分野まで幅広く扱っています。また、主要学会・協会や著名研究機関と連携し、世界標準となる学問レベルを追求しています。

**【インプレスグループ】 <https://www.impressholdings.com/>**

株式会社インプレスホールディングス（本社：東京都千代田区、代表取締役：塚本由紀）を持株会社とするメディアグループ。「IT」「音楽」「デザイン」「山岳・自然」「航空・鉄道」「モバイルサービス」「学術・理工学」を主要テーマに専門性の高いメディア&サービスおよびソリューション事業を展開しています。さらに、コンテンツビジネスのプラットフォーム開発・運営も手がけています。

**【お問い合わせ先】**

株式会社近代科学社

TEL:03-6837-4828

電子メール: [kdd-qa@kindaikagaku.co.jp](mailto:kdd-qa@kindaikagaku.co.jp)