

## 科 目 名

# コンピュータ科学 Computer Aided Science

2年 後期 2単位 選択

迫 口 明 浩

## 概 要

コンピュータは、高速に、正確に、大量の情報を処理することができ、人類の様々な活動を支えている。ナノサイエンス及びナノテクノロジー分野においても、物理・化学・生化学的現象の計測、制御、データ解析などでコンピュータのこれらの特性が発揮されている。本講では、コンピュータの構成と基本性能、プログラミングの基礎などについて概説する。さらに、コンピュータとネットワークを用いて、情報の収集、加工、発信などを行う情報処理技術を修得し、知的生産技術の向上を目指す。

## 目 標

コンピュータのハードとソフトの基本概念を理解し、コンピュータを用いて情報の収集、加工、発信などを行う情報処理技術を修得する。

## 授業計画

テ ー マ	内 容
① コンピュータ科学とは	コンピュータの発達の歴史、コンピュータとナノサイエンスとの関わり。シラバスの説明と成績のつけかたの説明。
② データ解析(1)	物理量の表現法、図・表の特徴。レポート（その1）
③ データ解析(2)	最小2乗法。レポート（その2）
④ データ解析(3)	EXCEL の利用（a）、表と計算機能。レポート（その3）
⑤ データ解析(4)	EXCEL の利用（b）、作図、相関・回帰法。レポート（その4）
⑥ データ解析(5)	EXCEL を用いたデータ解析の演習。レポート（その5）
⑦ プレゼンテーション(1)	プレゼンテーションの基礎、Power Point の基本操作。レポート（その6）
⑧ プレゼンテーション(2)	Power Point を用いた発表資料の作成。レポート（その7）
⑨ プログラミング(1)	コンピュータの仕組み、アルゴリズム。レポート（その8）
⑩ プログラミング(2)	プログラミング言語、Visual BASIC。レポート（その9）
⑪ プログラミング(3)	EXCEL のマクロ、VBA。レポート（その10）
⑫ 計算化学(1)	計算機化学の基礎。レポート（その11）
⑬ 計算化学(2)	計算機化学の応用。レポート（その12）
⑭ 総括	授業全体のまとめ。学生による授業評価。
⑮ 定期試験	学生自身による自己評価。

## 授業方法

講義を行い、その講義に関連するレポートが12回課せられる。小試験を実施する。

## 学習到達度の評価

- ① 定期試験および小試験により行う。
- ② 適宜、レポートや小試験を行う。学生は、解答およびその解説を参考にして、自分自身で学習の到達度を評価する。教員は、提出されたレポートや小試験により学生の理解度をチェックしながら授業の進め方について工夫する。
- ③ 授業中の質問、授業ノートの点検を実施し、理解度を確認する。

## 評価方法

定期試験（50点）、講義時間の小試験とレポート（50点）とする。これらの合計点が60点に満たなければ再試験を実施する。

## 教 材

教科書：適宜プリントを配布する。

参考書：日本化学会 編「第5版 実験化学講座1 基礎編I 実験・情報の基礎」丸善  
日本化学会 編「第5版 実験化学講座12 計算化学」丸善