

# クラウド活用による数理データサイエンス AI 教育用の教材開発： クラウド IoT とケモインフォマティクス

後藤 仁志<sup>1),2),3)</sup>, 立花 尚登<sup>1)</sup>, 五十幡 康弘<sup>1),3)</sup>

1) 豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター

2) 豊橋技術科学大学 IT活用教育センター

3) 豊橋技術科学大学 情報・知能工学系

gotoh@tut.jp

## Development of Mathematical Data Science and AI Educational Materials Using Cloud Computing: Cloud IoT and Chemoinformatics

Hitoshi Goto<sup>1),2)</sup>, Naoto Tachibana<sup>1)</sup>, Yasuhiro Ikabata<sup>2)</sup>

1) Information and Media Center, Toyohashi University of Technology

2) Center for IT-based Education, Toyohashi University of Technology

3) Department of Computer Science and Engineering, Toyohashi University of Technology

### 概要

数理・データサイエンス・AI 教育プログラム (MDASH) 応用基礎レベルの再認定に向け、エキスパート向け教材「クラウド IoT」と「ケモインフォマティクス」を開発した。

## 1 はじめに

文部科学省認定の「数理データサイエンス AI (MDASH) 教育プログラム」は、デジタル社会の基礎的素養 (リテラシーレベル) と、専門分野での活用力 (応用基礎レベル) という二段階の学習目標を明確にし、体系的な知識・技術習得を促進することを目的としている[1]。認定された各大学の MDASH プログラムは 5 年の有効期間を経て、再認定 (または先行認定) の申請を行うことになっている。また、生成 AI の急速な拡大に伴い、令和 6 年 2 月に改訂されたモデルカリキュラムへの対応も要請されている。特に、理工系大学において重要な応用基礎レベルに対する改訂では、「生成 AI の基礎と展望」が追加され、これまで以上に、産業界や地域・自治体等と連携して、社会実例を題材とした構成が期待されている。

本稿では、本学の数理データサイエンス AI 教育プログラムである「GIKADAI-MDA」[2]の応用基礎レベルの新たな展開として、再認定に向けて現在、開発を進めている教材「クラウド IoT」と「ケモインフォマティクス」と、これらの教材を使って授業データの分析結果を紹介する。再認定を控えている既認定校の参考になれば幸いである。

## 2 応用基礎レベル用の教材改訂

### 2.1 Jupyter Notebook と Google Colaboratory

本学の学生の約 80%は高専出身者であり、学部 3 年次編入生として機械、電気・電子情報、情報・知能、応用化学・生命工学、建築・都市システム学の各課程に入学してくる。GIKADAI-MDA が開講した 2022 年当時、大多数の高専が MDASH 認定を受けていないため、編入学生のデータ科学や AI に関する知識やスキルのばらつきは大きく、特に、専門分野の違いによるプログラミングスキルの差は、授業進行への影響が大きいことが予想された。

本学オリジナルのデータサイエンス AI 教材「TK シリーズ」は、Jupyter Notebook 形式を採用することでプログラミングスキルの差をカバーするとともに、Google Colaboratory という SaaS 型クラウド実行環境を利用することで、完全オンラインでの授業を実現することができる。また、Jupyter Notebook サーバは学生の PC でも構築することができるため、BYOD (Bring Your Own Device) に対応可能で、応用基礎レベルの構成要素の一つである「AI 基礎: AI の構築と運用」に合わせた実習も行うことができる。

今でこそ Jupyter Notebook 形式の教材を採用する認定校は増えているが、コロナ禍という制約多い

中で開発してきたことが功を奏して、早い段階でこのような教材を開発できたことは幸いであった。

## 2.2 専門分野のデータ収集とデータ加工

「TK シリーズ」では、どちらかと言えば、スキルよりも知識の修得に重点を置いた教材である。つまり、より実践的な課題に取り組む前に出来ていて欲しいことを学ぶ教材であると言える。そして、いざ、実課題に向き合ったとき、最初の壁は「データ収集」と「データ加工」である。当然のことではあるが、専門分野や取り組むテーマ毎にデータの収集方法は異なり、データの種類によって加工方法も変わってくる。とはいえ、データ収集については、大別すれば、センサを使って取得するか、Web 上からダウンロードするかのどちらかになる。そして、前者については、IoT (Internet of Things) としてクラウド上でデータを収集することで、後者と同様、Web 上からダウンロードできる形式になる。

このような思考を積み重ねて、センサーIoTクラウドを学ぶための教材「クラウド IoT」と、専門性が強い化学・材料系のデータ加工を踏まえて、物質科学分野の機械学習を学ぶ教材「ケモインフォマティクス」の開発を開始した。前者は機械系や建築・都市システム学系、後者は電気・電子系や応用化学・生命工学系の学生向けのエキスパートレベルの教材に位置づけられる。

## 3 シラバス

以下に、二つの教材「クラウド IoT」と「ケモインフォマティクス」の授業目標と主な内容を示す。最近、「クラウド IoT」を使った講習会について、実施内容と結果分析は、別稿を参照されたい。

### 3.1 クラウド IoT

IoT とクラウドコンピューティングの基本概念を理解し、Raspberry Pi や AWS にを利用して実際のデータ収集、クラウドにおけるデータ保存、データ解析とその活用方法を学ぶ。実際にクラウドサービスを活用したシステム構築の基礎知識と実践力を身に付けることを目指す。また、メタバース空間において情報を可視化するダッシュボードの作成を通じて、最新の情報サービスプラットフォームの理解と開発のための基本スキルを学ぶ。主な内容は以下の通り：

- ・ クラウドコンピューティング基礎と実践
- ・ IoT デバイスとクラウド IoT

- ・ サーバレスコンピューティング
- ・ コンテナ技術
- ・ リアルタイムデータ処理

### 3.2 ケモインフォマティクス

ケモインフォマティクスは化学と情報学の融合分野である。データベースや機械学習を用いた化学分野の学術的研究、創薬、材料開発は近年盛んに行われており、化学における様々な情報を対象とするケモインフォマティクスの重要度は増している。本科目では、化学情報の中でも化合物と分子構造および物性に注目し、様々な化合物の表現方法および機械学習により化合物の物性予測等を行う方法を、演習を通して習得することを目標とする。主な内容は以下の通り：

- ・ 化合物の表現方法
- ・ 機械学習の基礎
- ・ データベースとデータセット
- ・ 分子記述子
- ・ 回帰モデルの構築・最適化
- ・ 分類モデルの構築
- ・ クラスタリングと次元削減
- ・ 深層学習の基礎とモデル構築・最適化
- ・ 逆解析とベイズ最適化

## 4 まとめと今後の展開

本学オリジナルの「TK シリーズ」は機械学習と AI 構築の基礎知識・スキル習得を目指すのに対し、「クラウド IoT」はセンサーデータのアップロードからデータベース構築・リアルタイム処理までの実践スキル、「ケモインフォマティクス」は化学物質を対象とした専門的データ科学・AI 技術の習得に重点を置く。今後は、AI 分析結果に基づく実空間制御やサイバー空間（メタバース）可視化技術など、データ駆動型課題解決につながる教材開発を進める。

## 参考文献

- [1] 文部科学省、「数理・データサイエンス・AI 教育プログラム認定制度」、[https://www.mext.go.jp/a\\_menu/koutou/suuri\\_datascience\\_ai/00001.htm](https://www.mext.go.jp/a_menu/koutou/suuri_datascience_ai/00001.htm), 2025 年 8 月 31 日閲覧。
- [2] 豊橋技術科学大学 IT 活用教育センター、「GIKADAI 数理データサイエンス AI 教育プログラム」、<https://cite.tut.ac.jp/program-series/mdash/>