

2020 年度次世代講義シラバス

科目名	分子性触媒インフォマティクスの基礎	言語：日本語
担当教員名	山口滋	
実施時期	1/29(金)	
実施場所	ご記入をお願いします	
<p><b>【講義目標・内容】</b></p> <p>有機化学のデータサイエンスに関する講義を行う。有機低分子を用いた反応における反応活性予測・解析のためのデータサイエンスに関する基礎および背景を学び、その概要を理解することを目標とする。とくに分子性触媒を用いた反応についてのインフォマティクスを取り扱う。また分子性触媒のデータ解析の実例を、少数サンプルの回帰分析を中心に紹介する。反応の回帰分析の実践も行う予定である。</p> <p><b>【成績評価の方法】</b></p> <p>課題：有機反応の反応活性（反応速度や選択性など）を目的変数とした線形重回帰分析を行なっている論文の解析を再現する。再現に加え、サンプルを一つ減らす、記述子を一つ減らすなどのアレンジした解析も行いレポートにまとめる。</p> <p>評価:5 段階評価。3 以上は単位認定</p> <p>評価項目：有機反応の回帰モデルの構築およびモデルの検証</p> <p>評価基準</p> <p>1:内容が課題と無関係</p> <p>2:記述内容に大きな誤りや不足等がある</p> <p>3:記述の不足や誤り等あるものの、概ね解析ができています</p> <p>4:解析ができていますものの、若干の記述の不足等がある</p> <p>5:的確に解析している</p> <p><b>【履修条件・注意事項など】</b></p> <p>ハンズオン形式のセミナーを含める予定である。詳細は追って連絡する。</p> <p><b>【履修登録方法】</b></p> <p>GTR 学生支援室が指定する期限までに、e ポートフォリオで参加登録を行う</p>		