

Табела 5.2. Спецификација предмета

Табела 5.11. Спецификација предмета			
Студијски програм: МАС Хемија			
Назив предмета: Машинско учење у хемији, МХ317			
Наставник/наставници: Сања Армаковић			
Статус предмета: Обавезан			
Број ЕСПБ: 5			
Услов: Нема			
Циљ предмета			
Оспособљавање студента за ефикасну употребу метода машинског учења у анализи хемијских података употребом програмског језика Python и осталих доступних алата.			
Исход предмета			
Након успешног завршетка курса студент ће бити у стању да: наводи основне концепте машинског учења; самостално примењује одговарајуће методе за анализу хемијских података коришћењем програмског језика Python; критички евалуира и интерпретира резултате добијене машинским учењем и на основу њих доноси одговарајуће закључке.			
Садржај предмета			
Теоријска настава			
Преглед кључних достигнућа у развоју машинског учења. Упознавање са фундаменталним концептима и принципима машинског учења. Основни типови машинског учења. Преглед основних модела машинског учења коришћених у хемији. Структура и примена неуронских мрежа у хемији. Методе и критеријуми за оцену перформанси модела. Преглед софтверских алата за примену машинског учења у хемији. Библиотеке за машинско учење у програмском језику Python. Технике и алгоритми за обраду и анализу слика. Примена машинског учења на практичне проблеме у хемији. Студије случаја.			
Практична настава			
Библиотеке за визуелизацију и манипулацију хемијским подацима. Припрема података за анализу и тренирање модела у хемији. Најпознатије Python библиотеке за машинско учење. Креирање регресионих и класификационих модела. Примена неуронских мрежа. Процена успешности модела. Примена генерисаног модела за предвиђање хемијских својстава материјала и аутоматизацију процеса. Генерисање модела за препознавање слика и примена у хемијској индустрији.			
Литература			
1. Армаковић Сања, Презентације са предавања доступне на еПМФ – порталу за подршку е-учењу. (уџбеник у припреми)			
2. Aurélien Géron, Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems, Third Edition, O'Reilly Media, Gravenstein Highway North, Sebastopol, 2022.			
3. Andreas C. Müller, Sarah Guido, Introduction to machine learning with Python: a guide for data scientists, O'Reilly Media, Gravenstein Highway North, Sebastopol, 2016.			
Помоћна литература			
4. Akshaya Karthikeyan, U Deva Priyakumar, Artificial intelligence: machine learning for chemical sciences, Journal of Chemical Sciences 134, 2, 2022. https://doi.org/10.1007/s12039-021-01995-2			
Број часова активне наставе 5		Теоријска настава: 3	Практична настава: 2
Методе извођења наставе			
Предавања, вежбе, студија случаја, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поени	Завршни испит	поени
активност у току предавања	10	писмени испит	30
практична настава	20	усмени испт	20
студија случаја	20		