Predviđanje svojstava molekula

Projektna dokumentacija

Verzija 1.0

Sadržaj

1. Puni naziv projekta 4

2. Skraćeni naziv projekta 4

3. Opis problema/teme projekta 4

4. Cilj projekta 4

5. Voditelj studentskog tima 4

6. Rezultat(i) 4

7. Slični projekti 4

8. Resursi 4

9. Glavni rizici 5

10. Smanjivanje rizika 5

11. Glavne faze projekta 5

12. Struktura raspodijeljenog posla (engl. *Work Breakdown Structure* - WBS) 5

13. Kontrolne točke projekta 5

14. Gantogram 5

15. Zapisnici sastanaka 5

Prijedlog i plan projekta

Na koji način koristiti predložak?

Tekst pisan u italic formi opisuje koje informacije je potrebno uključiti u pojedino poglavlje Prijedloga.

Za upis vlastitog teksta, potrebno je pritisnuti <ENTER> nakon italic teksta.

Tekst upisan u <trokutastim zagradama> treba zamijeniti s onim što se navodi.

Svi članovi tima trebaju pročitati plan i suglasiti se s njime, a to potvrđuju svojim potpisom na kraju dokumenta.

# Puni naziv projekta

[Navesti puni naziv projekta iz kojeg će biti vidljiva problematika/tematika kojom se projekt bavi.]

Primjena metoda strojnog učenja za predviđanje svojstava molekula

# Skraćeni naziv projekta

[Navesti skraćeni naziv projekta, ako je definiran.]

Predviđanje svojstava molekula

# Opis problema/teme projekta

[Objasniti problem, odnosno temu projekta, objasniti ukratko tip, uvjete i kontekst projekta.]

Ovim projektom nastoji se riješiti problem predviđanja ključnih svojstava molekula na temelju njihovih značajki korištenjem prediktivnih modela. Ovaj je problem potpodručje kemoinformatike, koja spaja kemiju i računalnu znanost, te nastoji pretvoriti molekularne podatke u korisne informacije. Kemoinformatika je ključno područje za brzo analiziranje velikih skupova kemijskih spojeva, što je neprocjenjivo u područjima poput otkrivanja lijekova, gdje je identificiranje novih spojeva s poželjnim svojstvima ključno, ali i resursno zahtjevno. Tradicionalno bi kemičari ručno sintetizirali i testirali ograničeni broj spojeva, no napredak u računalnim metodama sada omogućuje ubrzanje i smanjene troškove istraživanja.

Primjena strojnog učenja za predviđanje svojstava molekula može povećati točnost predikcija svojstava poput topljivosti, biološke aktivnosti ili toksičnosti, identificirajući suptilne obrasce u molekularnoj strukturi. Ove su predikcije posebno korisne u kontekstima gdje su biološka ili kemijska testiranja nepraktična ili skupa, jer modeli strojnog učenja, trenirani na velikim skupovima podataka, mogu približno zamijeniti ove eksperimente uz mnogo manje resursa. Ovaj pristup također omogućujućuje brzo filtriranje i prioritizaciju spojeva koji zadovoljavaju specifične kriterije, čime se olakšava brža i preciznija eksperimentalna validacija. Kroz takve prediktivne modele, kemoinformatika dodatno minimizira eksperimentalne zahtjeve i povećava preciznost u dizajnu i otkrivanju molekula​​.

# Cilj projekta

[Navesti predviđeni cilj ili ciljeve projekta. Definiranje ciljeva omogućuje određivanje pravca u kojem će se kretati izvođenje projekta. Navesti predviđeno trajanje projekta.]

Cilj projekta je primijeniti tehnike prediktivne analize u području kemoinformatike za predviđanje ključnih svojstava molekula na temelju njihovih postojećih ili izračunatih značajki izgradnjom modela koji može točno predvidjeti svojstva odabrane ciljne varijable (topljivosti, biološka aktivnost, toksičnost ili neka relevantna karakteristika).

# Voditelj studentskog tima

<Ime i prezime studenta>

Ana Francesca Stama

# Rezultat(i)

[Navesti što će se isporučiti na kraju projekta, voditi računa da osim rezultata u vidu nekog proizvoda ovdje treba navesti i svu dokumentaciju.]

Na kraju projekta isporučit će se izvješće u kojem će biti navedeni i opisani korišteni modeli, njihovi rezultati te interpretacija istih. Isporučit će se i korišteni modeli kako bi se mogli opet koristiti i potencijalno poboljšati. Također, isporučit će se i tehnička dokumentacija.

# Slični projekti

[Navesti projekte koji su povezani s dotičnim projektom.]

# Resursi

[Navesti ljudske i ostale resurse potrebne za uspješno dovršenje projekta. Popuniti tablicu raspoloživih članova tima s podacima važnim za projekt. Mogu se navesti znanja i vještine člana koje mogu biti od koristi za projekt, na primjer znanja Java-e, XML-a, iskustvo u radu s MS Projectom, sudjelovanje u sličnim projektima ili bilo kakva korisna informacija. Ako projekt koristi i druge resurse napraviti posebnu tablicu za njih. U kolonu Napomene treba upisati sve termine kad dotični član tima neće biti raspoloživ za rad na projektu (putovanja, odmori, odsustva).]

**Tablica ljudskih resursa**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Ime i prezime** | **E-mail adresa** | **GSM broj** | **Napomene** |
| Ana Francesca Stama | ana-francesca.stama@fer.hr | 0958831704 |  |
| Ana Vrabec | ana.vrabec@fer.hr | 0911983789 |  |
| Toni Borina | toni.borina@fer.hr | 0998605078 |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

# Glavni rizici

[Navesti glavne zapreke za ostvarenje uspjeha projekta, te posljedice ukoliko projekt ne uspije.]

Jedna od zapreka za ostvarenje uspjeha projekta jest činjenica da članovi ne posjeduju pretežito snažno predznanje u domeni kemije. Nadalje, skup podataka koji će se koristiti u ovom projektu mogao bi sadržavati nepostojeće, stršeće, ili netočne vrijednosti. Još jedan problem bi bio slučaj da se članovima tima ne poklapa raspored te se ne mogu često sastajati i diskutirati otkrioća, probleme, i daljnje korake projekta.

Posljedice neuspjeha projekta su razočarenje i potencijalno propuštanje zanimljivog otkrića.

# Smanjivanje rizika

[Navesti korake koji će se poduzeti kako bi se što je moguće više umanjio svaki od prethodno navedenih rizika.]

Nedostatak predznanja u domeni kemije nastojat će se umanjiti proučavanjem dostupne literature te, po potrebi, savjetovanjem s domenskim stručnjakom. Potencijalni problem sa skupom podataka riješit će se eksploratornom analizom i vizualizacijom, a u slučaju nedoumica, i konzultacijama s domenskim stručnjakom. Nadalje, problem rasporeda bit će riješen tekstualnom komunikacijom ili sastancima putem neke od online platformi.

# Glavne faze projekta

[Navesti glavne faze projekta, te ukratko objašnjenje po kojem načelu je projekt podijeljen na te faze- vremenska organizacija, smanjenje rizika, raspoloživost resursa i/ili nešto drugo.]

1. Priprema podataka: prikupljanje postojećeg skupa podataka koji sadrži informacije o molekulama u odabranom formatu iz baze PubChem.
2. Obrada podataka: eksploratorna analiza, čišćenje, i transformacija podataka
3. Izgradnja modela: izgradnja jednog ili više prediktivnih modela, korištenjem strojnog učenja, koji će pokušati predvidjeti odabrano svojstvo na temelju dostupnih podataka
4. Evaluacija modela: procjena točnosti modela koristeći adekvatne metrike
5. Interpretacija rezultata: objašnjenje dobivenih rezultata, istraživanje mogućih promjena i poboljšanja modela

# Struktura raspodijeljenog posla (engl. *Work Breakdown Structure* - WBS)

[Nacrtati WBS s navedenim aktivnostima projekta.]

A diagram of a company

Description automatically generated

# Kontrolne točke projekta (engl. *milestones*)

[Općenito, kontrolna točka projekta je događaj ili rezultat neke aktivnosti koji ukazuje na to je li projekt u skladu sa zadanim rokovima ili kasni. Ta informacija se upisuje u kolonu o statusu projekta. Ako projekt kasni moraju se poduzeti akcije da se rokovi dostignu. Za svaku kontrolnu točku treba odrediti točan datum. Po potrebi se mogu dodavati ili oduzimati redovi tablice.]

**Tablica kontrolnih točki projekta**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Kontrolne točke** | **Planirani datum** | **Realizirani datum** | **Status projekta** |
| Predaja plana projekta | 9.11.2024. |  |  |
| Dva tjedna pred predaju | 10.1.2025. |  |  |
| Predaja projekta | 20.1.2025. |  |  |
|  |  |  |  |

# Gantogram

[Izraditi Gantogram pomoću programa MS Project, Open Workbench, Microsoft Excel - http://office.microsoft.com/hr-hr/excel/HA010346051050.aspx, i sl. Pohraniti prikaz Gantograma (screenshot) i postaviti ga unutar ovog poglavlja kao ubačenu sliku.]

Slika

# Zapisnici sastanaka

[Ovdje za svaki održani sastanak navesti: datum, vrijeme i mjesto održavanja sastanaka, popis nazočnih, glavne zaključke sastanka.]

1. 6.11.2024., 18.00, Zagreb; nazočni: svi; pisanje plana projekta

|  |  |
| --- | --- |
| **Suglasan s dokumentom (potpisuju članovi tima):** |  |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| < Ime i prezime > | Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |

|  |  |
| --- | --- |
| **Odobrio(potpisuje nastavnik):**  < Ime i prezime > |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Datum: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ | Potpis: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |