

Rijeka, 14.03.2025.

Zavod: Zavod za računarstvo  
Predmet: Evolucijsko računarstvo

## ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Pristupnik: **Jakov Cvetko (0069089563)**  
Studij: Sveučilišni diplomski studij računarstva (1400)  
Modul: Programsко инженерство (1441)

Zadatak: **Klasifikacija toksičnosti malih molekula i peptida / Toxicity Classification for Small Molecules and Peptides**

Opis zadatka:

Istražiti problem toksičnosti malih molekula i peptida, s posebnim naglaskom na one s terapeutskom namjenom. Pregledati relevantnu literaturu te preuzeti skupove podataka koji sadrže pozitivne i negativne instance za oba skupa podataka. Optimizirati odabranu arhitekturu neuronske mreže i provesti preobradu podataka s ciljem poboljšanja njihove klasifikacijske sposobnosti. Analizirati mogućnost prijenosa znanja između modela za klasifikaciju malih molekula i peptida kroz zajednički modalitet reprezentacije kemijske strukture. Vrednovati rezultate i usporediti ih s postojećim modelima iz literature.

Rad mora biti napisan prema Uputama za pisanja diplomskih / završnih radova koje su objavljene na mrežnim stranicama studija.

Zadatak uručen pristupniku: 21.03.2025.

Mentor:  
prof. Goran Mauša

Predsjednik povjerenstva za  
diplomski ispit:  
prof. dr. sc. Ivan Štajduhar

Komentor:  
dr. sc. Erik Otović