



1. PREDMET: UVOD V METODE UMETNE INTELIGENCE V KEMIJI

Šifra: 30-2035

Število kreditnih točk (ECTS): 9

Obseg ur: 45; predavanja 45, vaje 0, seminarji 0

PROGRAM: podiplomski študij – smer Kemija

2. VZGOJNOIZOBRAŽEVALNI CILJI

- seznaniti študente z osnovami teorije in prakse za pripravo avtomatičnih računalniških odločitvenih sistemov v kemiji (razpoznavanje vzorcev, ekspertni sistemi, klasično modeliranje, parametrične in nelinearne načini učenja,
- nevronske mreže in druge metode umetne inteligence),
- podati osnovna znanja o nevronskih mrežah in njihovi uporabi v kemiji,
- podati teorijo optimizacijskih postopkov (gradientna metoda, metoda SIMPLEX, genetski algoritmi, optimizacije s pomočjo numeričnih modelov) in razložiti uporabo razloženih metod pri različnih kemijskih problemih,

3. VSEBINA

Predmet je v bistvu nadaljevanje predmeta Kemometrija v analizni kemiji, vendar je na tej stopnji zahtevano bolj poglobljeno matematično znanje z ustreznimi dokazi in izpeljavami posameznih postopkov ter hkratni poznavanje osnovnih naravoslovnih principov različnih metod. Obdelane so različne transformacije, predvsem pa razne modelne metode s katerimi poskušamo s kompleksnimi podatki (opisi z velikim številom spremenljivk) razložiti posamezne ali skupinske lastnosti spojin ali procesov. Poudarek je dan na različnih vrstah nevronske mreže (vzvrtno širjenje napake, Kohonenove mreže, protitočne mreže itd.). Pomemben del snovi predstavlja spoznavanje različnih opisov kemijskih struktur za delo z računalniki. Predvsem gre v tem poglavju za uniformne in reverzibilne strukturne reprezentacije. Naslednje stopnja je kombiniranje različnih metod za doseg posameznih ciljev, kot npr. generiranje logičnih “če-potem” (“if-then”) pravil, ki služijo za opisovanje in napovedovanje posameznih lastnosti spojin v bolj zapletenih okoljih, ko formalne informacije za napovedi ne zadoščajo več. Zaključno poglavje je teorija in uporaba genetskih algoritmov.

4. POVEZANOST Z DRUGIMI PREDMETI

Zaželjeno, čeprav ne nujno je znanje matematike I. Predmet je v osnovi “infrastrukturne” narave, saj daje podlago za uporabo pri vseh ostalih eksperimentalno naravnih predmetih zlasti pri različnih spektroskopijah in analizni ter sintezni kemiji. Študentja spoznajo pomen načrtovanja eksperimentov, različne načine ovrednotenja rezultatov in metode za modeliranje posameznih lastnosti. Znanje, ki ga posreduje predmet je v sodobnem raziskovalnem in

industrijskem laboratoriju ključ do uspešnega zaključka kateregakoli eksperimentalnega dela v vseh vejah kemije (in tudi drugod). Smiselno predmet sodi v prvi ali drugi letnik.

5. ŠTUDIJSKA LITERATURA

GLAVNI UČBENIK :

1. D.L Massart, B.G.M. Vandengiste, L.M.C. Buydens, S.DeJong, P.J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, Elsevier, Amsterdam, Part A (1997), Part B (1998),
2. J. Zupan, J. Gasteiger, Neural Networks for Chemists: An Introduction, VCH, Weinheim, 1993 (Second edition 1999),

DODATNA LITERATURA

pregledni članki in tutorials iz različnih kemometrijskih področij itd.

6. OBVEZNOSTI ŠTUDENTA

Pisni in ustni izpit (po dogovoru lahko tudi seminar).

PRIPRAVIL: Jure Zupan

DATUM: 25. 07. 2003