



Студијски програм/студијски програми: Интегрисане академске студије фармације

Назив предмета: Хемометрија

Наставник: Ана С. Пилиповић, Михаљ М. Поша

Статус предмета: изборни

Број ЕСПБ: 3

Услов: Математика

Циљ предмета

Основни циљ предмета је да изгради логичан оквир основних информација о повезивању структуре молекула (лека) и биолошке активности односно физичко хемијских особина помоћу математичких модела.

Исход предмета

Студент треба да савлада основе математичких метода који се користе у хемометрији и који се реализују путем рачунарских програма

Садржај предмета

Теоријска настава

- Молекулски дескриптори.
- Основи принципи QSAR.
- Скалирање података: *centering, autoscaling, maximum scaling, range scaling, generalized range scaling*.
- Груписање молекула у вишедимензионалном простору: хијерархијско груписанje (*clustering*), нехијерархијско груписање, *fuzzy* груписање
- Анализа фактора (*factor analysis*), метода главних компоненти (*principial component analysis*).
- Постављање модела помоћу вишеструке регресије
- Генетички алгоритми
- Вештачке неуронске мрже - Кохоненова мржа

Практична настава

Примена рачунарских програма: *SPSS, Statistica, Sybyl, Chem 3D ultra*

Литература

Обавезна

- Поша М. Основне методе у хемометрији. Медицински факултет, Нови Сад, 2010.

Допунска

- Пилиповић А. Скрипта са предавања.

Број часова активне наставе

Теоријска настава: 30

Практична настава: 15

Методе извођења наставе

Предавања, вежбе

Оцена знања (максимални број поена 100)

Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	70
практична настава		усмени испит	
колоквијум-и		
семинар-и	20		