

WYDZIAŁ CHEMICZNY					
KARTA PRZEDMIOTU					
Nazwa przedmiotu w języku polskim:	Informatyka chemiczna				
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	Chemical informatics				
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):	Chemia i analityka przemysłowa				
Specjalność (jeśli dotyczy):					
Poziom i forma studiów	I stopień, II stopień – semestr uzupełniający, stacjonarna				
Rodzaj przedmiotu:	obowiązkowy				
Kod przedmiotu	INC014001, INC024009				
Grupa kursów	NIE				
	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)			30		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)			60		
Forma zaliczenia			Zaliczenie na ocenę		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS			2		
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			2		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)			1		
WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH					
1. Znajomość podstawowych zagadnień z zakresu chemii ogólnej, algebry liniowej, analizy matematycznej					
2. Znajomość języka angielskiego					
3. Podstawowa znajomość technologii informatycznych					
CELE PRZEDMIOTU					
C1 Zapoznanie studentów z systemem operacyjnym Linux.					
C2 Zapoznanie studentów z chemicznymi i biologicznymi bazami danych.					
C3 Zapoznanie studentów z formatem zapisu informacji w bazach danych.					
C4 Zapoznanie studentów z oprogramowaniem wykorzystywanym w rysowaniu i wizualizacji struktur chemicznych.					
C5 Zapoznanie studentów z podstawami języka skryptowego.					
C6 Wykształcenie u studentów umiejętności automatyzacji zadań obliczeniowych.					

PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Z zakresu wiedzy:

Osoba, która zaliczyła przedmiot:

PEK_W01 – zna podstawowe chemiczne i biologiczne bazy danych,

PEK_W02 – posiada wiedzę na temat formatu informacji w bazach chemicznych oraz bazach sekwencji biologicznych,

PEK_W03 – posiada wiedzę na temat narzędzi stosowanych w informatyce chemicznej oraz ich zastosowania,

PEK_W04 – posiada wiedzę na temat zasad tworzenia algorytmów oraz reguł i wyrażeń języka skryptowego.

Z zakresu umiejętności:

Osoba, która zaliczyła przedmiot:

PEK_U01 – potrafi posługiwać się systemem operacyjnym Linux,

PEK_U02 – posiada umiejętność wyszukiwania informacji w chemicznych bazach danych oraz bazach sekwencji biologicznych,

PEK_U03 – posiada umiejętność doboru odpowiednich metod i narzędzi do rozwiązania badanego problemu,

PEK_U04 – umie posługiwać się narzędziami do wizualizacji struktur chemicznych,

PEK_U05 – umie wykorzystać język skryptowy do zautomatyzowania pracy na komputerze i rozwiązywania prostych problemów numerycznych.

TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć - laboratorium		Liczba godzin
La1	Zajęcia wprowadzające. Zaznajomienie studenta z tematyką zajęć i organizacją pracy w pracowni komputerowej. Omówienie podstawowych narzędzi i oprogramowania wykorzystywanego podczas realizacji kursu. Wprowadzenie do systemu Linux.	2h
La2	Chemiczne bazy danych. Zaznajomienie studenta z najważniejszymi, chemicznymi i naukowymi bazami danych np. CSD, PDB, Reaxys, Scopus, NCBI i organizacją informacji w tych bazach.	2h
La3	Struktura danych w bazach chemicznych. Praktyczne zaznajomienie studenta z formatem danych w chemicznych i strukturalnych bazach danych oraz formatem zapisu sekwencji biologicznych w bazach danych. Praktyczne ćwiczenia z pozyskiwania informacji z omawianych baz danych.	2h
La4	Wizualizacja struktur chemicznych. Zaznajomienie studenta z oprogramowaniem umożliwiającym wizualizację jak i budowanie struktur cząsteczek np. Molden.	2h
La5	Indywidualne zadania z części I kursu.	2h
La6	Wprowadzenie do języka Python. Wprowadzenie typu danych liczbowych oraz operatorów arytmetycznych. Pierwsze skrypty wczytujące dane liczbowe i wykorzystujące operatory arytmetyczne (np. konwersja jednostek energii). Zaznajomienie studenta z trybem interaktywnym Pythona.	2h
La7	Podstawowe typy danych. Omówienie podstawowych typów danych, liczbowego i łańcuchów. Pisanie skryptów przetwarzających dane dostarczone przez użytkownika. Zapoznanie studenta z możliwościami korzystania z Pomocy.	2h
La8	Zastosowanie instrukcji warunkowej. Omówienie zasad tworzenia instrukcji warunkowej oraz tworzenia instrukcji złożonych. Praktyczne przykłady wykorzystania: np. obliczanie silni, drukowanie tabliczki mnożenia.	2h
La9	Zaawansowane typy danych – listy, krotki, słowniki. Omówienie sposobu tworzenia list, krotek i słowników oraz ich operatorów i metod. Pisanie skryptów wykorzystujących omawiane typy danych. Pisemne kolokwium I z programowania.	2h
La10	Zastosowanie pętli sterowanej warunkiem logicznym. Omówienie zasad tworzenia	2h

-	pętli sterowanej warunkiem logicznym wraz z przykładami jej zastosowania.	
La11	Moduły. Omówienie zasad importowania modułów i możliwości ich wykorzystania na przykładzie modułu math i random. Praktyczne przykłady z wykorzystaniem pętli sterowanej warunkiem logicznym.	2h
La12	Zastosowanie pętli sterowanej licznikiem. Omówienie zasad tworzenia pętli sterowanej licznikiem. Pisemne kolokwium II z programowania	2h
La13	Zastosowanie pętli sterowanej licznikiem. Praktyczne przykłady programów wykorzystujących pętle sterowane licznikiem oraz zadania wymagające tworzenia instrukcji złożonych.	2h
La14	Pliki tekstowe. Omówienie zasad przetwarzania plików tekstowych. Przykłady pracy z sekwencjami biologicznymi.	2h
La15	Pisemne kolokwium III z programowania. Poprawa kolokwiów I i II oraz dyskusja indywidualnych zadań.	2h
	Suma godzin	30
STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE		
N1. Wykład informacyjny N2. Pisanie programu N3. Wykorzystanie baz danych N4. Wykorzystanie oprogramowania N5. Rozwiązywanie zadań N6. Przygotowanie sprawozdania		
OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ		
Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
F1 (laboratorium)	PEK_W01- PEK_W03, PEK_U01-PEK_U04	Sprawozdanie z Indywidualnego zadania z części I kursu
F2 (laboratorium)	PEK_W03- PEK_W04, PEK_U01,PEK_U03, PEK_U05	Pisemne kolokwium I z programowania
F3 (laboratorium)	PEK_W03- PEK_W04, PEK_U01, PEK_U03, PEK_U05	Pisemne kolokwium II z programowania
F4 (laboratorium)	PEK_W03- PEK_W04, PEK_U01- PEK_U03, PEK_U05	Pisemne kolokwium III z programowania
P (laboratorium) = F1+F2+F3+F4		
LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA		
<u>LITERATURA PODSTAWOWA:</u>		
[1] <i>Python Crash Course</i> , Matthes E. No Starch Press, 2015		
<u>LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:</u>		
[1] http://docs.python.org		
[2] <i>Think Python: How to Think Like a Computer Scientist, 2nd edition</i> , A. B. Downey, O'Reilly, 2015		
[3] <i>Beginning the Linux Command Line</i> , S. Vugt. Springer, 2009		
[4] <i>A Primer on Scientific Programming with Python</i> , H. P. Langtangen, Springer, 2011		
OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)		
dr inż. Renata Grzywa, renata.grzywa@pwr.edu.pl		