

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Advanced nanoinformatics (Ćw. audytoryjne), PG_00051249						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		mgr inż. Michał Kałapus				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	30.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		15.0	50
Cel przedmiotu	zapoznanie studentów z aktualnym stanem, wyzwaniem i ostatnimi osiągnięciami w stosowaniu podejść obliczeniowych w charakteryzacji, modelowaniu oraz analizie nanomateriałów przedstawienie korzyści płynących z zastosowania nanoinformatyki do modelowania aktywności i toksyczności, właściwości, interakcji i losu nanomateriałów (NM)						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student potrafi krytycznie ocenić wyniki eksperymentów, obserwacji i obliczeń teoretycznych z zakresu nanoinformatyki, identyfikując potencjalne źródła błędów oraz niepewności pomiarowych. Student potrafi przeprowadzić analizę błędów oraz ocenić wpływ błędów na wiarygodność wyników. Student potrafi także dyskutować wyniki i wnioski z badań w sposób konstruktywny i merytoryczny.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizację zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student świadomie i odpowiedzialnie planuje oraz realizuje projekty badawcze z zakresu nanoinformatyki, uwzględniając potencjalny wpływ wyników badań na społeczeństwo i środowisko. Student potrafi zidentyfikować i ocenić etyczne oraz społeczne implikacje związane z rozwojem i zastosowaniem nanotechnologii.	[SK2] prezentacja/projekt/referat/ raport [SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_W09] Klasyfikuje specjalistyczne narzędzia informatyczne wykorzystywane w ocenie statystycznej wyników eksperymentu.	Student potrafi sklasyfikować i dobrać odpowiednie narzędzia informatyczne (np. pakiety statystyczne, oprogramowanie do analizy danych) do statystycznej oceny wyników eksperymentów z zakresu nanoscience, uwzględniając specyfikę danych oraz cel analizy. Student potrafi przeprowadzić analizę statystyczną wyników eksperymentu, zinterpretować wyniki oraz ocenić ich istotność statystyczną.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport
	[CHEMMU2_K02] Pracuje w zespole przyjmując w nim różne role.	Student potrafi efektywnie pracować w zespole przy realizacji projektów z zakresu nanoinformatyki, przyjmując różne role (lidera, wykonawcy, recenzenta) oraz dostosowując swoje działania do potrzeb zespołu. Student potrafi komunikować się z innymi członkami zespołu, dzielić się wiedzą i umiejętnościami oraz rozwiązywać konflikty.	[SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student potrafi zastosować podstawowe metody matematyczne (np. rachunek różniczkowy i całkowy, algebra liniowa, statystyka) do analizy i interpretacji danych eksperymentalnych oraz teoretycznych modeli z zakresu nanoinformatyki. Student potrafi wykorzystać matematykę do opisu i modelowania procesów chemicznych zachodzących w nanoskali.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW5] realizacja zadania problemowego
	[CHEMMU2_W08] Wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii.	Student potrafi zastosować pogłębioną wiedzę teoretyczną z zakresu metod obliczeniowych i informatycznych (np. modelowanie molekularne, symulacje dynamiki molekularnej, metody kwantowo-chemiczne) do rozwiązywania problemów z chemii, w szczególności związanych z nanomateriałami. Student potrafi dobrać odpowiednie metody do konkretnego problemu badawczego, przeprowadzić obliczenia, zinterpretować wyniki oraz ocenić ich wiarygodność.	[SW1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SW2] prezentacja/projekt/referat/ raport

	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_U03] Wyszukuje potrzebne informacje w literaturze fachowej, bazach danych i innych źródłach, wymienia podstawowe czasopisma naukowe z chemii.	Student potrafi samodzielnie wyszukiwać i analizować informacje naukowe z zakresu nanoinformatyki, korzystając z różnorodnych źródeł, takich jak bazy danych (np. Web of Science, Scopus, PubMed), czasopisma naukowe (np. Nature Nanotechnology, ACS Nano, Nano Letters, Small) oraz literatura fachowa. Student potrafi ocenić wiarygodność i przydatność znalezionych informacji.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/ dyskusja [SU3] opracowanie tekstowe/ praca pisemna
Treści przedmiotu	<p>Kurs obejmuje praktyczne zagadnienia z zakresu nanoinformatyki, które obejmują: wprowadzenie do obszarów nanotechnologii, nanonauki i nanomateriałów, wprowadzenie do nanoinformatyki i modelowania statystycznego (gromadzenie danych, metadane i ontologie w nanoinformatyce;</p> <p>nanodeskrytory; nienadzorowane techniki analizy podobieństwa, profilowania i grupowania; nadzorowane techniki wypełniania luk w danych, zastosowanie modeli obliczeniowych/narzędzi/pakietów oprogramowania do obliczania/modelowania aktywności i toksyczności, właściwości, (bio)interakcji i losów NM, zastosowanie kombinacji podejść do modelowania dla wybranych nanocząstek (np. nanostruktur węglowych, nanocząstek tlenków metali, nanocząstek metali i nanocząstek metali) dyskusje grupowe na temat wybranych prac z zakresu nanoinformatyki/nanotechnologii, opublikowanych w najlepszych czasopismach</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Wprowadzenie do programowania w języku Python - Wprowadzenie do programowania w języku R - Chemia kwantowa w praktyce - Analiza eksploracyjna wielowymiarowej przestrzeni chemicznej - Uczenie maszynowe w chemii Deskrytory molekularne</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	obserwacja zachowania studenta podczas zajęć i konsultacji	50.0%	20.0%
	prezentacja ustna i argumentacja podczas dyskusji	50.0%	80.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	The EU US Nanoinformatics 2030 Roadmap: <a href="https://www.nanosafetycluster.eu/outputs/eu-us-roadmap-nanoinformatics-2030/">https://www.nanosafetycluster.eu/outputs/eu-us-roadmap-nanoinformatics-2030/</a>	
	Uzupełniająca lista lektur	Nanoscience and Advancing Computational Methods in Chemistry: Research Progress (Eds.) Eduardo A. Castro and A.K. Haghi, 2012	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Zarządzanie danymi w nanoinformatyce, gromadzenie danych, opiekę nad nimi, metadane, ontologie i nanodeskrytory. Analiza danych obejmuje nienadzorowane techniki analizy podobieństwa, profilowania i grupowania, a także nadzorowane techniki uzupełniania luk w danych.</p> <p>Modelowanie obliczeniowe w nanonauce wykorzystuje modele/narzędzia/pakiety oprogramowania do obliczania/modelowania aktywności, toksyczności, właściwości, (bio)interakcji i losów nanomateriałów.</p> <p>Studium przypadku zastosuje kombinację podejść do modelowania dla wybranych nanocząstek (np. nanostruktur węglowych, tlenków metali).</p>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.