Modulbeschreibung 39-Inf-ACI Algorithmische Chemieinformatik

Technische Fakultät

Version vom 16.11.2026

Dieses Modulhandbuch gibt den derzeitigen Stand wieder und kann Änderungen unterliegen. Aktuelle Informationen und den jeweils letzten Stand dieses Dokuments finden Sie im Internet über die Seite

https://ekvv.uni-bielefeld.de/sinfo/publ/modul/543618437

Die jeweils aktuellen und gültigen Regelungen im Modulhandbuch sind verbindlich und konkretisieren die im Verkündungsblatt der Universität Bielefeld veröffentlichten Fächerspezifischen Bestimmungen.

39-Inf-ACI Algorithmische Chemieinformatik

Fakultät

Technische Fakultät

Modulverantwortliche*r

Prof. Dr. Daniel Merkle

Turnus (Beginn)

Jedes Sommersemester

Leistungspunkte

5 Leistungspunkte

Kompetenzen

Studierende können nach Absolvieren des Moduls Verfahren für komplexe diskrete Berechnungsprobleme der algorithmischen Chemieinformatik benennen und in ihrer Funktion erklären.
Sie können weiterhin komplexe diskrete Berechnungsprobleme der algorithmischen Chemieinformatik mithilfe algorithmischer Ideen, graphentheoretischer Ansätze sowie unter Einsatz von Mitteln der diskreten Mathematik und Komplexitätstheorie lösen.
Sie können die behandelten Informatik-Methoden auf verschiedene Abstraktionsebenen der Chemie (z.B. die quantenmechanische Ebene, die Ebene der Molekulardynamikmodelle, grobkörnige Modellierungsebene) übertragen, d. h. eine Methode unter Anleitung auch auf andere als die behandelte Situation anwenden.
Die Studierenden sind in der Lage zu einer vorgegebenen Praxissituation bzw. chemisch und biochemisch motivierten Problemstellung die passende Methode der algorithmischen Chemieinformatik sowie die Abstraktionsebene zu wählen.
Studierende sind dazu befähigt, die behandelten Ansätze praxisorientiert bewerten zu können und in der Chemie anzuwenden zu können, was die Fähigkeiten einschließt, Algorithmen auszuwählen, zu verstehen, anzuwenden und entsprechende Algorithmen und Datenstrukturen zu implementieren.

Lehrinhalte

Im Rahmen des Kurses werden u.a. folgende Themen behandelt: die Repräsentation molekularer Strukturen, formale Graphersetzungssystem, Graphenisomorphie und Graphenkanonisierung, kombinatorische Strukturen sowie analytische Kombinatorik in der Chemie, minimale Zyklusbasen, Petrinetze und die Anwendung algorithmischer Methoden der Chemieinformatik im Bereich des metabolischen Engineerings und industrieller Anwendungen.

The following topics are contained in the course: representation of molecular structures, graph rewriting, graph isomorphism and graph canonicalization, combinatorial structures and analytic combinatorics in chemistry, minimum cycle bases, Petrinets, and the applications of algorithmic cheminformatics for metabolic engineering and for industrial applications in general.

Empfohlene Vorkenntnisse

Grundlagen in der Programmierung, z.B. 39-MBT6a oder 39-Inf-PP

Notwendige Voraussetzungen

–

Erläuterung zu den Modulelementen

Modulstruktur: 1 bPr [1]

Veranstaltungen

Titel	Art	Turnus	Workload [5]	LP[2]
Algorithmische Chemieinformatik	Vorlesung	SoSe	60 h (30 + 30)	2 [Pr]
Übungen zur Algorithmischen Chemieinformatik	Übung	SoSe	60 h (30 + 30)	2

Prüfungen

Zuordnung Prüfende	Art	Gewichtung	Workload	LP[2]

Lehrende der Veranstaltung **Algorithmische Chemieinformatik (Vorlesung)** *Portfolio mit Abschlussprüfung bestehend aus:* *1) Portfolio von Übungen zu Inhalten der Vorlesung* *Übungsaufgaben oder Programmieraufgaben, die veranstaltungsbezogen gestellt werden (Bestehensgrenze 50% der erzielbaren Punkte). Die Kontrolle der Übungsaufgaben umfasst auch direkte Fragen zu den Lösungsansätzen, die von den Studierenden in den Übungen beantwortet werden müssen. Der*die Lehrende kann ein individuelles Erläutern und Vorführen von Aufgaben verlangen sowie einen Teil der Übungsaufgaben durch Präsenzübungen ersetzen. Die Übungsaufgaben im Rahmen des Portfolios werden in der Regel wöchentlich ausgegeben und dienen dem begleitenden Erlernen selbständiger Umsetzungen der in der Vorlesung vorgestellten Lerninhalte.* *2) einer Abschlussprüfung zur Vorlesung* *Die Abschlussprüfung zu den Inhalten der Vorlesung nimmt Bezug auf die Übungs- oder Programmieraufgaben oder entwickelt sich aus den in den Übungen erlernten Kompetenzen.* *Eine weitergehende Konkretisierung insbesondere zum zeitlichen Umfang der Abschlussprüfung erfolgt in der Beschreibung der Veranstaltung.* *Abschlussklausur (im Umfang von 90-180 Minuten) oder mündliche Abschlussprüfung (im Umfang von 20-40 Minuten) zu den in der Vorlesung vermittelten und in den Übungen erarbeiteten Inhalten.* *Die Klausur kann alternativ als eKlausur, Open Book Klausur oder eOpen Book Klausur geprüft werden. Im Falle von Open Book Klausur und eOpen Book Klausur beträgt der Umfang 120-180 Minuten.* *Alternativ kann ein Essay (im Umfang von ca. 4 A4-Seiten) mit einer stark auf die vermittelten Kenntnisse und Fähigkeiten bezogenen Aufgabenstellung ODER ein Essay (bis zu 4 A4-Seiten als Abschlussbericht) mit einer stark auf die vermittelten Kenntnisse und Fähigkeiten bezogenen Programmieraufgabe von der*dem Lehrenden vorgesehen werden. Es handelt sich um eine reflektive Aufgabenstellung zu Systematik und Zusammenhängen der Lerninhalte oder um eine Auseinandersetzung mit einer Programmieraufgabe zu den erlernten Inhalten.* *Beide Portfolioelemente werden durch eine*n Prüfer*in geprüft. Es erfolgt eine abschließende Gesamtbewertung.*	Portfolio mit Abschlussprüfung	1	30h	1

Legende

1 Die Modulstruktur beschreibt die zur Erbringung des Moduls notwendigen Prüfungen und Studienleistungen.

2 LP ist die Abkürzung für Leistungspunkte.

3 Die Zahlen in dieser Spalte sind die Fachsemester, in denen der Beginn des Moduls empfohlen wird. Je nach individueller Studienplanung sind gänzlich andere Studienverläufe möglich und sinnvoll.

4 Erläuterungen zur Bindung: "Pflicht" bedeutet: Dieses Modul muss im Laufe des Studiums verpflichtend absolviert werden; "Wahlpflicht" bedeutet: Dieses Modul gehört einer Anzahl von Modulen an, aus denen unter bestimmten Bedingungen ausgewählt werden kann. Genaueres regeln die "Fächerspezifischen Bestimmungen" (siehe Navigation).

5 Workload (Kontaktzeit + Selbststudium)

SoSe Sommersemester

WiSe Wintersemester

SL Studienleistung

Pr Prüfung

bPr Anzahl benotete Modul(teil)prüfungen

uPr Anzahl unbenotete Modul(teil)prüfungen