

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Zastosowanie informatyki w chemii</b>
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013
Specjalność:	chemia podstawowa i stosowana
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	<b>Sokołowski Stefan, prof. dr hab.</b>
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	podstawowy
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"><li>• ćwiczenia laboratoryjne</li></ul>
Zakres tematów:	<p>W ramach ćwiczeń student pisze programy o wzrastającym stopniu złożoności. Zadania dostosowane są do kolejno realizowanych tematów.</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Edycja, kompilacja, uruchamianie programów.</li><li>2. Standardowe wejście i wyjście. Wczytywanie i wyprowadzanie wartości zmiennych różnych typów.</li><li>3. Planowanie wydruków. Lista argumentów wyjściowych procedur Write i WriteLn.</li><li>4. Tworzenie wyrażeń.</li><li>5. Podstawowe instrukcje (instrukcja przypisania, instrukcja wywołania, procedury, instrukcja złożona)</li><li>6. Instrukcje warunkowe 'if' oraz 'case'</li><li>7. Pętle: 'while', 'for', 'repeat ... until'. Przykłady zastosowań.</li><li>8. Zmienne tablicowe.</li><li>9. Obsługa plików. Zapisywanie do pliku, czytanie z pliku.</li><li>10. Tablicowanie funkcji.</li><li>11. Podprogramy: funkcje, procedury.</li><li>12. Mechanizmy komunikacji z podprogramem: zmienne globalne, funkcyjne zwracanie wartości, parametry przekazywane przez wartość, parametry przekazywane przez zmienną.</li><li>13. Różniczkowanie numeryczne.</li><li>14. Całkowanie numeryczne (metoda trapezów, metoda Simpsona)</li><li>15. Rozwiązywanie równań nieliniowych (metoda bisekcji, metoda Newtona)</li><li>16. Metody aproksymacji (regresja liniowa)</li><li>17. Przykłady zastosowań w chemii.</li></ol>
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"><li>• ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne</li><li>• ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)</li></ul>
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"><li>1. A.Marciniak, Turbo Pascal 5.5, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 1993.</li><li>2. A.Marciniak, Turbo Pascal 7, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 2002.</li><li>3. M.Sysło, Elementy informatyki w szkole, PWN, Warszawa, 1993.</li><li>4. A.Björck, G.Dahlquist, Metody numeryczne, PWN, Warszawa, 1983.</li><li>5. Z.Fortuna, B.Macukow, J.Wąsowski, Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 2001.</li></ol>