

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Zastosowanie informatyki w chemii</b>
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	analityka chemiczna
Rok/Semestr:	I/2
Liczba godzin:	45,0
Nauczyciel:	<b>Borówko Małgorzata, 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. Z.Fortuna, B.Macukow, J.Wąsowski, Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 2001.</li> </ol>
Modułowe efekty kształcenia:	<ol style="list-style-type: none"> <li>01 Sformułować zasady tworzenia algorytmów, podać zasady programowania strukturalnego</li> <li>02 Wymienić podstawowe elementy wybranego języka programowania, typy zmiennych, instrukcje</li> <li>03 Opisać i wyjaśnić podstawowe metody numeryczne</li> <li>04 Opisać typy metod obliczeniowych stosowanych w chemii</li> <li>05 Napisać prosty program komputerowy w wybranym języku</li> <li>06 Zastosować metody numeryczne w obliczeniach chemicznych</li> <li>07 Korzystać z wybranych programów użytkowych i naukowych baz danych</li> <li>09 Korzystając z podręcznika potrafi samodzielnie zaimplementować proste metody numeryczne</li> <li>10 Uświadomić sobie znaczenie i ograniczenia metod komputerowych stosowanych w chemii, szybkość rozwoju technik informatycznych i konieczność stałego kształcenia</li> <li>12 Samodzielnie wyszukiwać informacje w literaturze naukowej, internecie i bazach danych (także w językach obcych)</li> </ol>