

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Zastosowanie informatyki w chemii
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	chemia podstawowa i stosowana
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	Zientarski Tomasz, dr
Forma zajęć:	laboratorium
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Poziom trudności:	podstawowy
Metody dydaktyczne:	<ul style="list-style-type: none"> • ćwiczenia laboratoryjne
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"> 1. Edycja, kompilacja, uruchamianie programów. 2. Standardowe wejście i wyjście. Wczytywanie i wyprowadzanie wartości zmiennych różnych typów. 3. Planowanie wydruków. Lista argumentów wyjściowych procedur Write i WriteLn. 4. Tworzenie wyrażeń. 5. Podstawowe instrukcje (instrukcja przypisania, instrukcja wywołania, procedury, instrukcja złożona) 6. Instrukcje warunkowe 'if' oraz 'case' 7. Pętle: 'while', 'for', 'repeat ... until'. Przykłady zastosowań. 8. Zmienne tablicowe. 9. Obsługa plików. Zapisywanie do pliku, czytanie z pliku. 10. Tablicowanie funkcji. 11. Podprogramy: funkcje, procedury. 12. Mechanizmy komunikacji z podprogramem: zmienne globalne, funkcyjne zwracanie wartości, parametry przekazywane przez wartość, parametry przekazywane przez zmienną. 13. Różniczkowanie numeryczne. 14. Całkowanie numeryczne (metoda trapezów, metoda Simpsona) 15. Rozwiązywanie równań nieliniowych (metoda bisekcji, metoda Newtona) 16. Metody aproksymacji (regresja liniowa) 17. Przykłady zastosowań w chemii.
Forma oceniania:	<ul style="list-style-type: none"> • ćwiczenia praktyczne/laboratoryjne • ocena ciągła (bieżące przygotowanie do zajęć i aktywność)
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> 1. A.Marciniak, Turbo Pascal 5.5, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 1993. 2. A.Marciniak, Turbo Pascal 7, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 2002. 3. M.Sysło, Elementy informatyki w szkole, PWN, Warszawa, 1993. 4. A.Björck, G.Dahlquist, Metody numeryczne, PWN, Warszawa, 1983. 5. Z.Fortuna, B.Macukow, J.Wąsowski, Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 2001.
Modułowe efekty kształcenia:	<ol style="list-style-type: none"> 01 Sformułować zasady tworzenia algorytmów, podać zasady programowania strukturalnego 02 Wymienić podstawowe elementy wybranego języka programowania, typy zmiennych, instrukcje 03 Opisać i wyjaśnić podstawowe metody numeryczne 04 Opisać typy metod obliczeniowych stosowanych w chemii 05 Napisać prosty program komputerowy w wybranym języku 06 Zastosować metody numeryczne w obliczeniach chemicznych 09 Korzystając z podręcznika potrafi samodzielnie zaimplementować proste metody numeryczne 10 Uświadomić sobie znaczenie i ograniczenia metod komputerowych stosowanych w chemii, szybkość rozwoju technik informatycznych i konieczność stałego kształcenia 12 Samodzielnie wyszukiwać informacje w literaturze naukowej, internecie i bazach danych (także w językach obcych)