

## Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	<b>Zastosowanie informatyki w chemii</b>
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Specjalność:	chemia podstawowa i stosowana
Rok/Semestr:	II/3
Liczba godzin:	15,0
Nauczyciel:	<b>Rżysko Wojciech, dr hab.</b>
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	egzamin
Punkty ECTS:	2,0
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 15,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu
Poziom trudności:	podstawowy
Metody dydaktyczne:	• wykład informacyjny
Zakres tematów:	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Elementy historii informatyki. Podstawowe zastosowanie komputerów.</li> <li>2. Wprowadzenie do programowania strukturalnego. Twierdzenie o strukturze.</li> <li>3. Tworzenie algorytmów. Sekwencja, selekcja, iteracja.</li> <li>4. Elementy języka Pascal.</li> <li>5. Ogólny schemat programu w Pascalu.</li> <li>6. Definicje, deklaracje.</li> <li>7. Pojęcie zmiennej. Typy zmiennych.</li> <li>8. Standardowe wejście i wyjście.</li> <li>9. Podstawowe instrukcje: instrukcja przypisania instrukcja wywołania procedury, instrukcja złożona, instrukcje warunkowe 'if' oraz 'case', petle: 'while', 'for', 'repeat ... until'.</li> <li>10. Obsługa plików.</li> <li>11. Różniczkowanie numeryczne.</li> <li>12. Całkowanie numeryczne (metoda trapezów).</li> <li>13. Rozwiązywanie równań nieliniowych (metoda trapezów).</li> <li>14. Metody aproksymacji (regresja liniowa).</li> <li>15. Przykłady zastosowań w chemii.</li> <li>16. Symulacje komputerowe</li> </ol>
Forma oceniania:	• egzamin pisemny
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>
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>