

Sylabus przedmiotu

| | |
|---|--|
| Przedmiot: | Zastosowanie informatyki w chemii |
| Kierunek: | Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2013 |
| Specjalność: | chemia środków bioaktywnych i kosmetyków |
| Rok/Semestr: | II/3 |
| Liczba godzin: | 15,0 |
| Nauczyciel: | Rżysko Wojciech, dr hab. |
| Forma zajęć: | wykład |
| Rodzaj zaliczenia: | egzamin |
| Punkty ECTS: | 3,0 |
| 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 |
| Zakres tematów: | <ol style="list-style-type: none"> 1. Elementy historii informatyki. Podstawowe zastosowanie komputerów. 2. Wprowadzenie do programowania strukturalnego. Twierdzenie o strukturze. 3. Tworzenie algorytmów. Sekwencja, selekcja, iteracja. 4. Elementy języka Pascal. 5. Ogólny schemat programu w Pascalu. 6. Definicje, deklaracje. 7. Pojęcie zmiennej. Typy zmiennych. 8. Standardowe wejście i wyjście. 9. Podstawowe instrukcje: instrukcja przypisania instrukcja wywołania procedury, instrukcja złożona, instrukcje warunkowe 'if' oraz 'case', petle: 'while', 'for', 'repeat ... until'. 10. Obsługa plików. 11. Różniczkowanie numeryczne. 12. Całkowanie numeryczne (metoda trapezów). 13. Rozwiązywanie równań nieliniowych (metoda trapezów). 14. Metody aproksymacji (regresja liniowa). 15. Przykłady zastosowań w chemii. 16. Symulacje komputerowe |
| Forma oceniania: | • egzamin pisemny |
| 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 07 Korzystać z wybranych programów użytkowych i naukowych baz danych 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) |