

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Zastosowanie informatyki w chemii (C-CK.I2-ZICH)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Computer science in chemistry

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Chemii

Przedmiot dla jednostki: Wydział Chemii

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Opis:

Moduł obejmuje wiedzę z zakresu podstaw programowania, metod numerycznych i zastosowań informatyki w chemii.

Wykład obejmuje następujące zagadnienia:

Elementy historii informatyki. Podstawowe zastosowania komputerów. Wprowadzenie do programowania strukturalnego. Twierdzenie o strukturze. Tworzenie algorytmów. Sekwencja, selekcja, iteracja. Elementy języka Pascal. Schemat programu. Definicje, deklaracje. Pojęcie zmiennej. Typy zmiennych. Standardowe wejście i wyjście. Podstawowe instrukcje. Obsługa plików. Wybrane metody numeryczne: całkowanie numeryczne, rozwiązywanie równań nieliniowych, metody aproksymacji (regresja liniowa). Przykłady zastosowań w chemii. Symulacje komputerowe (metoda Monte Carlo, dynamika molekularna).

Laboratorium obejmuje następujące zagadnienia:

Programowanie w Pascalu. Wybrane metody numeryczne: Pisanie, uruchamianie i testowanie programów o wzrastającym stopniu złożoności. Rozwiązywanie prostych problemów obliczeniowych z zakresu chemii.

Literatura:

A. Marciniak, Turbo Pascal 5.5, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 1993.

A. Marciniak, Turbo Pascal 7, BUM, Wydawnictwo Nakom, Poznań, 2002.

A. Björck, G. Dahlquist, Metody numeryczne, PWN, Warszawa, 1983.

Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 2001.

M. Sysło, Elementy informatyki w szkole, PWN, Warszawa, 1993.

A. Patrykiewicz, Wprowadzenie do metody Monte Carlo, UMCS, Lublin, 1998.

Efekty uczenia się:

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:

WIEDZA

W1. Potrafi sformułować zasady tworzenia algorytmów, podać zasady programowania strukturalnego K_W12;

W2. Potrafi wymienić podstawowe elementy wybranego języka programowania, typy zmiennych, instrukcje K_W12

W3. Potrafi opisać i wyjaśnić podstawowe metody numeryczne K_W12

W4. Potrafi opisać typy metod obliczeniowych stosowanych w chemii K_W12

UMIĘTNOŚCI

U1. Umie napisać prosty program komputerowy w wybranym języku; K_U17

U2. Potrafi zastosować metody numeryczne w obliczeniach chemicznych K_U18

U3. Potrafi korzystać z wybranych programów użytkowych i naukowych baz danych K_U19

U4. Korzystając z podręcznika potrafi samodzielnie zaimplementować proste metody numeryczne K_U34

KOMPETENCJE

K1. Ma świadomość znaczenia i ograniczeń metod komputerowych stosowanych w chemii, szybkości rozwoju technik informatycznych i konieczności stałego kształcenia K_K01

K2. Potrafi samodzielnie wyszukiwać informacje w literaturze naukowej, internecie i bazach danych (także w językach obcych) K_K05

Na podstawie Uchwały Senatu UMCS uchwałą Nr XXIV-8.4/17 z dnia 28 czerwca 2017 r. tj. od cyklu kształcenia 2017/2018 student:

WIEDZA

W1. Zna i rozumie podstawy metod obliczeniowych oraz oprogramowania K_W09

UMIĘTNOŚCI

U1. Potrafi wykorzystywać zdobytą wiedzę do rozwiązywania różnych problemów typowych dla studiowanej specjalności, w tym wykorzystania metod numerycznych K_U01

KOMPETENCJE

K1. Jest gotów do oceny własnej wiedzy i rozumie konieczność dalszego kształcenia K_K01

Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS

Godziny kontaktowe (z udziałem nauczyciela akademickiego)
Wykład 15
Laboratorium 30
Łączna liczba godzin z udziałem nauczyciela akademickiego 45
Liczba punktów ECTS z udziałem nauczyciela akademickiego 1,5

Godziny niekontaktowe (praca własna studenta)
Przygotowanie się do laboratorium 30
Studiowanie literatury 15
Przygotowanie się do egzaminu 30
Łączna liczba godzin niekontaktowych 75
Liczba punktów ECTS za godziny niekontaktowe 2,5
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla modułu 4

Sposób weryfikacji efektów kształcenia

Sposób weryfikacji efektów kształcenia na studiach pierwszego stopnia zatwierdzonych na podstawie Uchwały Senatu UMCS Nr XXII-39.9/12 z dnia 25 kwietnia 2012 r. tj. od cyklu kształcenia 2012/2013:

W1. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
W2. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
W3. wykład (egzamin pisemny), laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
W4. wykład (egzamin pisemny), laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)

U1. wykład (egzamin pisemny), laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
U2. wykład (egzamin pisemny), laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
U3. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
U4. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
K1. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)
K2. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia śródsesemestralne)

Sposób weryfikacji efektów kształcenia na studiach pierwszego stopnia zatwierdzonych na podstawie Uchwały Senatu UMCS uchwałą Nr XXIV- 8.4/17 z dnia 28 czerwca 2017 r. tj. od cyklu kształcenia 2017/2018:

W1. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia),
wykład (egzamin pisemny, pozytywny wynik egzaminu)
U1. wykład (egzamin pisemny), laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia)
K1. laboratorium (ćwiczenia laboratoryjne, ocena ciągła lub kolokwia)

Wymagania wstępne

Podstawowa znajomość obsługi komputera

Punkty przedmiotu w cyklach:

<bez przypisanego programu>			
Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	4	14/15L	