

KÉMIAI PROGRAMOZÁSI GYAKORLAT – **TKBL0903** – 2 kr  
*Előfeltétel: TKBL0901 Kémiai informatikai alapok.*

A kurzus célja, hogy egy numerikus számolásokra és vizuális megjelenítésre alkalmas programozási környezet, programnyelv (például MatLab, Maple, Delphi, Visual Basic, stb.) alapfokú használata során a hallgatók megismerjék a programozás alapfogalmait, az adott programnyelv eszközeit; továbbá képessé váljanak a matematikai tanulmányaik során vagy újonnan megismert matematikai módszereket kémiai problémák megoldására alkalmazni.

Rövid tematika: Programozási alapismeretek. A választott programnyelv elemeinek megismerése és használata. Matematikai objektumok tulajdonságainak számítógépes tanulmányozása. Egyenletmegoldó numerikus módszerek és a legkisebb négyzetek módszerének részletesebb tanulmányozása. Több más numerikus módszer alkalmazásának bemutatása kémiai problémák megoldására (könyvtári rutinok felhasználásával).

*Ajánlott irodalom:*

1. Stoyan Gisbert (szerk.): MATLAB 4. és 5. verzió, numerikus módszerek, grafika, statisztika, eszköztárak, TypoTEX, Budapest, 1998
2. Czenky Márta - Tamás Péter - Vágási János: Tanuljunk együtt az informatikát! ECDL elméleti modul. 5. fejezet: Szoftverképzési alapismeretek, ComputerBooks, Budapest, 2004
- 3.