

Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Metody numeryczne z algorytmami analizy danych			13.3.0618
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii Teoretycznej			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Józef Liwo; prof. UG, dr hab. Cezary Czaplewski			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		2	
Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 15 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 50 godz. = 2 pkt. ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 zimowy			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
fakultatywny (do wyboru)	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
	Sposób zaliczenia		
	Zaliczenie na ocenę		
	Formy zaliczenia		
	- Zaliczenie na ocenę - wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja		
	Podstawowe kryteria oceny		
	Ćwiczenia laboratoryjne: Wykonanie projektu (indywidualnie w grupach - 3 osobowych) i przedstawienie go prowadzącemu.		
Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia			
Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:			
Student wykracza poza kanoniczny kurs matematyki w chemii (K_W05); weryfikacja przez ocenę rozwiązań zadawanych problemów numerycznych w chemii (K_W06) oraz końcowe zaliczenie.			
Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:			
Student projektuje, programuje i testuje odpowiedni algorytm (K_U02) w ramach projektów indywidualnych bądź zespołowych.			
Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:			
Student myśli krytycznie, podejmuje decyzje, pracuje w zespole. (K_K02).			
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi			
A. Wymagania formalne			
Matematyka, Fizyka, Podstawy chemii, Chemia analityczna, Technologia Informatyczna, Programowanie I			
B. Wymagania wstępne			
Podstawy chemii i obliczeń chemicznych i obliczeń w chemii analitycznej, podswawy analizy matematycznej i algebry liniowej, umiejętność pracy w systemie UNIX, umiejętność programowania w języku C lub Fortran.			
Cele kształcenia			
• Zapoznanie studentów z algorytmami numerycznymi mającymi zastosowanie w chemii.			
• Przygotowanie studentów do pisania własnych aplikacji numerycznych oraz do wykorzystywania w tym procesie istniejących bibliotek numerycznych.			

Treści programowe

Algorytm i jego poprawność. Błędy w obliczeniach numerycznych; lematy Wilkinsona. Wskaźnik uwarunkowania zadania. Nadmiar (INF), niedomiar i NaN. Różniczkowanie numeryczne. Całkowanie numeryczne. Rozwiązywanie układów równań liniowych. Rozwiązywanie zagadnienia własnego: zastosowanie w chemii kwantowej. Rozwiązywanie równań nieliniowych. Rozwiązywanie układów równań nieliniowych; przykład: obliczanie stężeń równowagowych w układach wieloskładnikowych. Minimalizacja lokalna funkcji jednej i wielu zmiennych i jej zastosowanie w mechanice molekularnej. Algorytmy minimalizacji sum kwadratów w analizie danych pomiarowych: regresja liniowa oraz nieliniowa (metoda Newtona-Gausa, Newtona i Levenberga-Marquardta); zastosowanie w wyznaczaniu stałych równowag. Statystyczna ocena dobroci dopasowania oraz obszarów ufności wyznaczanych parametrów. Wyznaczanie parametrów z danych o wysokim poziomie szumu albo niepełnych: algorytmy największej entropii. Rozwiązywanie równań różniczkowych zwyczajnych: numeryczne algorytmy kinetyki chemicznej oraz dynamiki molekularnej. Rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych: zastosowania w obliczaniu krzywych cyklowoltamperometrycznych i polarograficznych oraz energii solwatacji makromolekuł. Transformacja Fouriera i jej zastosowanie do przetwarzania sygnału w pomiarach spektroskopowych. Algorytmy analiza skupień. Algorytmy analizy czynnikowej i ich praktyczne zastosowania do rozkładu widm absorpcyjnych i emisyjno-absorpcyjnych, QSAR, analizy konformacyjnej.

Wykaz literatury

- A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):
 Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski. Metody numeryczne, WNT, Warszawa
 S. Brand, Analiza danych, PWN, Warszawa
 B. Literatura uzupełniająca
 J. i M. Jankowscy, Przegląd metod i algorytmów numerycznych, WNT, Warszawa.
 S. Brand, Analiza danych, PWN, Warszawa
 J. Stoer. Wstęp do metod numerycznych. PWN, Warszawa.
 J. B. Czerwiński, A. Iwasiewicz i in.: Metody statystyczne w doświadczeniach chemicznych. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1992.
 C.R. Rao, Modele liniowe statystyki matematycznej, PWN, Warszawa.
 G.A.F., Seber, C.J. Wild, Nonlinear regression, Wiley.
 R.G. Brereton, Chemometrics, Wiley.

**Efekty kształcenia
(obszarowe i kierunkowe)**

- K_W05: operuje poszerzoną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności;
 K_W06: stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności;
 K_U02: krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy;
 K_K02: pracuje w zespole przyjmując w nim różne role

Wiedza

Student opisuje zagadnienia arytmetyki zmiennoprzecinkowej oraz wyjaśnia przyczyny i implikacje błędów zaokrągleń. Definiuje pojęcie algorytmu. Opisuje podstawowe algorytmy numeryczne stosowane do rozwiązywania równań i układów równań liniowych i nieliniowych, minimalizacji funkcji celu oraz rozwiązywania zagadnienia początkowego i brzegowego dla równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych. Student opisuje metody numeryczne mające zastosowanie do danego zagadnienia chemii obliczeniowej lub chemometrii.

Umiejętności

Student definiuje i rozwiązuje problemy związane ze specyfiką arytmetyki zmiennoprzecinkowej, które pojawiają się w obliczeniach przy użyciu dostępnych pakietów chemii kwantowej, mechaniki i dynamiki molekularnej, chemometrii, itp. Rozwiązuje problemy obliczeniowe pojawiające się w chemii i dziedzinach pokrewnych przy użyciu bibliotek programów dostępnych w centrach obliczeniowych lub sieci WWW. Projektuje w tym celu proste aplikacje numeryczne z wykorzystaniem procedur własnych lub bibliotecznych.

Kompetencje społeczne (postawy)

Student wyrabia w sobie umiejętność precyzyjnego i logicznego myślenia i wnioskowania. Poznaje zasady bezpiecznej, odpowiedzialnej i efektywnej pracy na stacjach roboczych podłączonych do sieci. Wyrabia w sobie odpowiedzialność za konto osobiste na stacji roboczej oraz za bezpieczeństwo jej zasobów. Wyrabia w sobie umiejętność pracy w zespole.

Kontakt

jozef.liwo@ug.edu.pl