


KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu			Kod ECTS
Metody numeryczne z algorytmami analizy danych			13.3.0408
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
null			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Chemia	forma	stacjonarne
		moduł	chemia obliczeniowa
		specjalnościowy	wszystkie
specjalizacja			
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			5 zajęcia 60 godz. konsultacje 10 godz. praca własna studenta 55 godz. RAZEM: 125 godz. - 5 ECTS
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 30 godz.			
Cykl dydaktyczny			
2017/2018 letni			
Status przedmiotu	Język wykładowy		
obowiązkowy	polski		
Metody dydaktyczne	Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
	Sposób zaliczenia		
	- Zaliczenie na ocenę		
	- Egzamin		
	Formy zaliczenia		
- wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja			
- egzamin pisemny testowy			
Podstawowe kryteria oceny			
Ćwiczenia laboratoryjne: Wykonanie projektu (indywidualnie w grupach 2- 3 osobowych) i przedstawienie go prowadzącemu. Wykłady: zdanie egzaminu testowego ze znajomości zagadnień poruszanych na wykładzie (50% lub więcej maksymalnej liczby punktów).			
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 końcowy egzamin.			
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, podsway 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. Interpolacja: schematy Lagrange'a i Newtona. Różniczkowanie numeryczne. Całkowanie numeryczne: kwadratury Newtona-Cotesa i Gaussa. Rozwiązanie układów równań liniowych: metody Gaussa, Gaussa-Jordana, Choleskiego, Householdera, QR. Rozwiązanie zagadnienia własnego: zastosowanie w chemii kwantowej. Rozwiązanie równań nieliniowych: metody Newtona, reguła fałsi, siecznych, pegaza, bisekcji. Rozwiązanie układów równań nieliniowych; przykład: obliczanie stężeń równowagowych w układach wieloskładnikowych. Minimalizacja lokalna funkcji jednej i wielu zmiennych i jej zastosowanie w mechanice molekularnej. Zarys metod minimalizacji globalnej funkcji i jej związek z przewidywaniem struktur makromolekuł, agregatów molekularnych i kryształów. Algorytmy minimalizacji sum kwadratów w analizie danych pomiarowych: regresja liniowa oraz nieliniowa (metoda Newtona-Gaussa, 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. Rozwiązanie równań różniczkowych zwyczajnych: numeryczne algorytmy kinetyki chemicznej oraz dynamiki molekularnej. Rozwiązanie 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. Czermański, 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.

Umiejętność

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. Pozna-je 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
adam.liwo@ug.edu.pl