

**Karta przedmiotu**

Nazwa i kod przedmiotu	Numerical methods with algorithms for physical sciences (Ćw. laboratoryjne), PG_00129569						
Kierunek studiów	Chemia (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			arabski ENG		
Semestr studiów	4	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Chemii						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. Adam Sieradzan				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		5.0		15.0	50
Cel przedmiotu	Zapoznanie studentów z algorytmami numerycznymi stosowanymi w chemii. Przygotowanie studentów do pisania własnych aplikacji numerycznych, z uwzględnieniem istniejących bibliotek numerycznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[CHEMMU2_W06] Stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o średnim poziomie złożoności.	Student opisuje problemy arytmetyki zmiennoprzecinkowej oraz wyjaśnia przyczyny i skutki zaokrąglenia zmiennoprzecinkowych. Student definiuje pojęcie algorytmu, opisuje podstawowe algorytmy numeryczne stosowane w rozwiązywaniu równań i układów równań liniowych i nieliniowych, minimalizacji funkcji celu równań i układów równań liniowych i nieliniowych, minimalizacji funkcji celu oraz rozwiązywania początkowych i brzegowych odpowiednio dla równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych. Student opisuje metody numeryczne, które mogą być zastosowane do rozwiązania danego problemu z zakresu chemii obliczeniowej lub chemometrii.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_W05] Operuje pogłębioną wiedzą w zakresie studiowanej specjalności.	Student opisuje metody numeryczne, które mogą być zastosowane do rozwiązania danego problemu chemii obliczeniowej lub chemometrii.	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_K06] W sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizacji zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność.	Student rozwija umiejętności dokładnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania. Student uczy się zasad bezpiecznej, odpowiedzialnej i wydajnej pracy z wykorzystaniem stacji roboczych podłączonych do Internetu. Student rozwija odpowiedzialność za swoje osobiste konto na stacji roboczej.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SK2] prezentacja/projekt/referat/raport
	[CHEMMU2_K01] Zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby.	Student rozwija umiejętności dokładnego i logicznego myślenia oraz wnioskowania. Student uczy się zasad bezpiecznej, odpowiedzialnej i wydajnej pracy z wykorzystaniem stacji roboczych podłączonych do Internetu. Student rozwija umiejętność pracy w zespole.	[SK1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SK2] prezentacja/projekt/referat/raport [SK8] obserwacja samodzielnej lub zespołowej pracy studenta
	[CHEMMU2_U02] Krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy.	Student definiuje i rozwiązuje problemy związane ze specyfiką arytmetyki zmiennoprzecinkowej, które pojawiają się przy korzystaniu z dostępnych pakietów chemii kwantowej, mechaniki i dynamiki molekularnej, chemometrii itp. Student rozwiązuje problemy obliczeniowe, które pojawiają się w chemii i przedmiotach pokrewnych podczas korzystania z bibliotek oprogramowania dostępnych w centrach komputerowych, lub w Internecie. Student projektuje w tym celu proste aplikacje numeryczne wykorzystujące procedury własne lub biblioteczne.	[SU1] wypowiedź ustna/rozmowa/diskusja [SU2] prezentacja/projekt/referat/raport [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych
	[CHEMMU2_W01] Operuje pogłębioną wiedzą na temat spektroskopowych metod analizy związków chemicznych.	Student opisuje metody numeryczne, które mogą być zastosowane do rozwiązania danego problemu z zakresu chemii obliczeniowej lub chemometrii	[SW2] prezentacja/projekt/referat/raport

Treści przedmiotu	<p>Algorytm i jego poprawność. Błędy w obliczeniach numerycznych; lematy Wilkinsona. Numer warunku problemu. Przepiętnie (INF), niedopełnienie, NaN.</p> <p>Interpolacja: Schematy Lagrange'a i Newtona. Różniczkowanie numeryczne. Całkowanie numeryczne: kwadratury Newtona-Coatesa i Gaussa. Rozwiązywanie układów równań liniowych: algorytmy Gaussa, Gaussa-Jordana, Cholesky'ego, Householdera i QR. Rozwiązywanie problemów wartości własnych w chemii kwantowej.</p> <p>chemii kwantowej. Rozwiązywanie układów równań nieliniowych: algorytmy Newtona, reguła fałsi, secant, Pegasus i bisection. Rozwiązywanie układów równań nieliniowych równań nieliniowych; obliczanie stężeń równowagowych w układach wieloskładnikowych jako przykład. Lokalna minimalizacja funkcji w jednej i kilku zmiennych</p> <p>zmiennych w odniesieniu do analizy konformacyjnej z wykorzystaniem mechaniki molekularnej.</p> <p>Wprowadzenie do algorytmów optymalizacji globalnej i ich związek z problemem z problemem znajdowania najbardziej stabilnych struktur molekuł i kryształów. Algorytmy najmniejszych kwadratów w dopasowywaniu modeli do danych eksperymentalnych: regresja liniowa i nieliniowa (regresja Newtona).regresja liniowa i nieliniowa (metody Newtona-Gaussa, Newtona i Levenberga-Marquardta): zastosowanie w wyznaczaniu stałych równowagi. Statystyczna ocena dobroci dopasowania i poziomów ufności wyznaczonych parametrów. Określanie parametrów na podstawie lub niewystarczających danych: metoda maksymalnej entropii. Algorytm rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych: zastosowanie do kinetyki chemicznej i dynamiki molekularnej. Algorytmy rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych: zastosowania do analizy elektrochemicznej (np. obliczanie profili voltamperometrii cyklicznej i polarografii) oraz do obliczania elektrostatycznej energii solwatacji makrocząsteczek. Transformacja Fouriera i jej zastosowanie do przetwarzania widm IR i NMR. Algorytmy analizy skupień. Algorytmy analizy czynnikowej i ich zastosowanie do dekompozycji widm UV, QSAR i analizy konformacyjnej.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Wprowadzenie do programowania w języku Python Podstawy rachunku różniczkowego i algebry liniowej, umiejętność korzystania z systemu operacyjnego LINUX.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	raporty z wykonania zadań	51.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<p>Siegmund Brandt, Data Analysis - Statistical and Computational Methods for Scientists and Engineers, Springer 2014</p> <p>Extracurricular readings</p> <p>Qingkai Kong, Timmy Siau, Alexandre Bayen, Python Programming and Numerical Methods</p> <p>A Guide for Engineers and Scientists, Academic Press 2020</p>	
	Uzupełniająca lista lektur	Python Programming for Arduino - Desai Pratik	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania			
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.