



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Metody matematyczne w chemii, PG_00038882						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2021 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu	2020/2021				
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć	Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów				
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji	na uczelni				
Rok studiów	1	Język wykładowy	polski				
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS	2.0				
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia	egzamin				
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. inż. Jacek Czub					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	15.0	0.0	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	Celem przedmiotu jest pogłębienie wiedzy i umiejętności studentów w zakresie zaawansowanych metod matematycznych stosowanych w chemii i dziedzinach pokrewnych, ze szczególnym uwzględnieniem algebry liniowej, analizy wektorowej, teorii szeregów i transformaty Fouriera, probabilistyki i metod numerycznych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W01] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie niektórych działów matematyki, obejmującą elementy matematyki dyskretniej i stosowanej oraz metody optymalizacji w tym metody matematyczne	Student zdobywa pogłębioną wiedzę matematyczną w zakresie umożliwiającym studiowanie na poziomie ilościowym zagadnień chemii kwantowej i teoretycznej, spektroskopii, krystalografii, termodynamiki statystycznej, biofizyki molekularnej i dziedzin pokrewnych. Student uczy się posługuje się terminologią i formalizmem matematycznym stosowanym w algebrze liniowej, analizie wektorowej, analizie Fourierowskiej, teorii procesów stochastycznych i metodach numerycznych. Student uczy się wykorzystywać wiedzę teoretyczną zdobytą na wykładzie do implementacji zagadnień matematycznych w postaci programów komputerowych w celu rozwiązania zaawansowanych matematycznie problemów o znaczeniu chemicznym.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób	Student rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób.	[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
	[K7_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych i innych źródeł, również w języku angielskim, potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji i krytycznej oceny, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie,	Student uczy się konfrontować wyniki przewidywań teoretycznych dotyczących własności cząsteczek chemicznych z danymi literaturowymi i eksperymentalnymi.	[SU1] Ocena realizacji zadania
	[K7_W02] ma uporządkowaną, poszerzoną wiedzę związaną ze współczesną chemią, obejmującą właściwości oraz otrzymywanie związków chemicznych, niezbędne do dokonywania obliczeń i rozwiązywania problemów technicznych, w tym obejmujące zależność struktury związku i jego reaktywność	Student uczy się formalizmu matematycznego metod chemii teoretycznej stosowanych do przewidywania własności cząsteczek, w tym relacji między strukturą a reaktywnością.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej

Treści przedmiotu	<p>Wykład:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Algebra liniowa (operacje na wektorach i macierzach, aksjomatyczna definicja iloczynu skalarnego, układy równań liniowych, regresja wielokrotna, cztery fundamentalne podprzestrzenie, bazy ortogonalne i i macierze ortogonalne (unitarne), zagadnienie własne, diagonalizacja, własności macierzy symetrycznych (hermitowskich), transformacja przez podobieństwo, rozkład spektralny macierzy, macierze dodatnio określone, rozkład na wartości osobiwe, wprowadzenie do metody LCAO-MO, metoda Hueckela, analiza drgań normalnych, analiza głównych składowych)</li> <li>Analiza wektorowa (krzywe i powierzchnie zadane parametrycznie, wektory styczne i normalne do krzywych i powierzchni, długość łuku, różniczka i pochodna zupełna, gradient i operator gradientu, metoda mnożników Lagrange'a, pochodna kierunkowa, pola skalarne i wektorowe, całkowanie – zamiana zmiennych, Jakobian, całki krzywoliniowe i powierzchniowe, własności pól gradientowych, rotacja pola wektorowego, strumień pola wektorowego, twierdzenie Stokesa i twierdzenie Greena, dywergencja pola wektorowego, równanie ciągłości, twierdzenie Gaussa-Ostrogradskiego, laplasjan, równanie dyfuzji, równania Poissona i Laplace'a, równanie Poissona-Boltzmanna, tożsamości wektorowe)</li> <li>Analiza Fourierowska: elementy teorii Sturm Liouville'a, rozwijanie funkcji w szereg w ortogonalnej bazie funkcyjnej, wielomiany ortogonalne, szeregi Fouriera i ich zbieżność, baza Fourierowska, zespolona postać szeregu Fouriera, szeregi Fouriera funkcji parzystych, nieparzystych i kawałkami ciągłych, równość Parsevala, różniczkowanie i całkowanie szeregów Fouriera, transformata Fouriera i jej własności, odwrotna transformata Fouriera, delta-funkcja Diraca, zastosowanie transformaty Fouriera w spektroskopii i krystalografii, dyskretna transformata Fouriera, szybka transformata Fouriera, twierdzenie o splocie i jego zastosowania, twierdzenie Nyquista-Shannona o próbkowaniu</li> <li>Elementy teorii procesów stochastycznych (gęstość prawdopodobieństwa i dystrybuanta, procesy stochastyczne i ich własności, stacjonarność procesu stochastycznego, autokorelacja, biały szum, metody Monte Carlo, równanie Langevina i dynamika Brownowska, elementy teorii procesów Markowa, macierze Markowa i ich rozkład spektralny, modele Markowowskie w kinetyce chemicznej i biologii, równania Fokkera-Plancka i Smoluchowskiego)</li> </ol> <p>Ćwiczenia:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Wprowadzenie do programowania w Octave (zmiennie, instrukcje sterujące, funkcje, reprezentacje macierzy i operacje na nich)</li> <li>Podjęcie numeryczne do rozwiązywania równań różniczkowych i modelowania procesów Markowa; proste modele opisujące: kinetykę bistabilnych reakcji wielosubstratowych, termodynamikę dimeryzacji, kooperatywność na poziomie molekularnym</li> <li>Zagadnienie własne: podstawy analizy głównych składowych i teorii Huckla, kwantowochemiczne podstawy pojęcia aromatyczności, podstawy teorii przejść elektronowych, wpływ heteroatomów na energie orbitalne</li> <li>Zagadnienie własne: analiza modów normalnych w kontekście spektroskopii IR, podejście numeryczne do przewidywania widm w podczerwieni</li> <li>Elementy analizy wektorowej w numerycznym podejściu do problemów optymalizacyjnych (minimalizacja funkcji wielu zmiennych), optymalizacja struktury klastrów atomowych,</li> <li>Wybrane zagadnienia w analizie Fourierowskiej, zastosowanie szybkiej transformaty Fouriera do analizy sygnałów czasowych na przykładzie danych FID ze spektroskopii NMR, transformata Fouriera obrazów graficznych</li> </ol>											
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowa znajomość rachunku różniczkowego i całkowego oraz algebry liniowej.											
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Sposób oceniania (składowe)</th> <th>Próg zaliczeniowy</th> <th>Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Ćwiczenia</td> <td>50.0%</td> <td>70.0%</td> </tr> <tr> <td>Wykład</td> <td>50.0%</td> <td>30.0%</td> </tr> </tbody> </table>	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	Ćwiczenia	50.0%	70.0%	Wykład	50.0%	30.0%		
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej										
Ćwiczenia	50.0%	70.0%										
Wykład	50.0%	30.0%										
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <p>Adresy eZasobów</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Donald A. McQuarrie "Matematyka dla przyrodników i inżynierów"</li> <li>Erich Steiner "Matematyka dla chemików"</li> <li>Henry Margenau "Matematyka w fizyce i w chemii"</li> <li>Zbigniew Skoczylas, "Elementy analizy wektorowej: teoria, przykłady, zadania"</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Gilbert Strang "Linear Algebra and Its Applications", 4th ed.</li> <li>George B. Arfken, Hans J. Weber "Mathematics for Physicists", 7th ed.</li> </ol>									

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Przykładowe zadania do rozwiązania w środowisku MATLAB/Octave:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Stwórz funkcję <math>z(v)</math>, która dla wektora współrzędnych <math>v = [x \ y]</math> zwróci wartość wybranej funkcji <math>z = f(x,y)</math>, np. <math>z = x^2 + 4y^2</math>. W oparciu o nią stwórz funkcję <math>\text{grad}(v)</math>, która przyjmując współrzędne <math>v = [x \ y]</math> zwróci znormalizowany gradient <math>\text{grad}(v) = [g_x \ g_y]</math>. Następnie napisz skrypt, który (1) wczyta punkt startowy <math>P</math>, (2) obliczy gradient funkcji w danym punkcie, (3) przemieści punkt <math>P</math> o zadany krok w kierunku przeciwnym do gradientu, (4) obliczy zmianę wartości funkcji <math>z = f(x,y)</math>, (5) powtórzy procedury 2-4 tak długo, aż wartość funkcji przestanie maleć.</li> <li>2. Wykorzystaj funkcję <code>toeplitz()</code>, by stworzyć macierz trójdziagonalną opisującą heksatrien w teorii Hückla. Oblicz energię elektronową sprzężonego układu <math>\pi</math>. Powtórz całą procedurę, modyfikując nieznacznie macierz tak, by opisywała cząsteczkę benzenu. Porównaj wyniki i skomentuj je.</li> </ol>
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy