

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet: UPORABA NUMERIČNIH METOD V KEMIJI
Course Title: NUMERICAL METHODS IN CHEMISTRY

Študijski program in stopnja Study Programme and Level	Študijska smer Study Field	Letnik Academic Year	Semester Semester
MAG Kemija, 2. stopnja	/	1.	1.
USP Chemistry, 2 nd Cycle	/	1 st	1 st

Vrsta predmeta / Course Type:

obvezni / Mandatory

Univerzitetna koda predmeta / University Course Code:

KE212

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje Work	Druge oblike študija	Samost. delo Individual Work	ECTS
30	15	30 LV	/	/	75	5

Nosilec predmeta / Lecturer:

prof. dr. Jurij Reščič / Dr. Jurij Reščič, Full Professor

Jeziki / Languages:

Predavanja / Lectures: slovenski / Slovenian

Vaje / Tutorial: slovenski / Slovenian

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

Študent oz. kandidat mora imeti predmet opredeljen kot študijsko obveznost.

Prerequisites:

The course has to be assigned to the student.

Vsebina:

Ponovitev in obravnava matematičnih orodij na splošno s poudarkom na konkretnih numeričnih primerih s področja kemije.

Uporaba nekaterih splošno uporabljenih programov (npr. Microsoft Excel) pri reševanju v nadaljevanju opisanih numeričnih problemov.

Osnove programiranja v enem izmed višjenivojskih programskih jezikov, v katerih je napisana večina programske opreme, ki se uporablja v kemiji (Python, Fortran, C).

Razčlenitev problema, prikaz poteka reševanja z blokovo shemo, opis in razlaga izbranega

Content (Syllabus outline):

Introduction into mathematical tools with applications to computational problems found mostly in chemistry.

Demonstration of usage of common software (e.g. Microsoft Excel) for scientific data processing and interpretation.

Basics of high-level programming language used in science (Python, Fortran and/or C). Decomposition of a given problem, block diagram flowchart, description of a chosen algorithm used to solve the problem, and designing appropriate computer code.

Main topics: rounding errors, statistical analysis (mean value, standard deviation), linear

algoritma za dani problem ter konstruiranje računalniškega programa.

Zaokrožitvene napake, statistični račun, regresijska analiza (korelacijski koeficienti), računanje s pomočjo rekurzijskih formul, reševanje sistemov linearnih enačb.

Matrike, inverzija matrik, lastni vektorji in lastne vrednosti matrik, LU razcep, numerično reševanje nelinearnih enačb in sistema nelinearnih enačb, numerično integriranje (trapezna in Simpsonova formula, metoda Monte Carlo), numerično odvajanje, interpolacija, naključna števila, iskanje ekstremov funkcij ene in več spremenljivk (metoda zlatega reza, gradientna in simplex metoda).

Numerično reševanje diferencialnih enačb 1. in 2. reda (metoda Runge-Kutta, metoda prediktor-korektor), numerično reševanje sistema diferencialnih enačb. Začetni in robni problemi. Parcialne diferencialne enačbe (difuzijska, valovna, Poissonova).

Diskretna Fourierova transformacija in njena uporaba pri analizi signalov merilnih inštrumentov.

regression analysis and correlation coefficients, recursion formulae, interpolation, systems of linear equations, matrices, inversion of matrices, eigenvectors and eigenvalues, LU decomposition, solving nonlinear equations, numerical integration (Trapezoidal and Simpson's rule, Monte Carlo method), numerical differentiation, interpolation, random numbers, minimization of functions of a single and multiple variables (golden ratio search, gradient and Simplex method). Numerical solving of differential equations of 1st and 2nd order (Euler's method, Runge-Kutta method, predictor-corrector method), systems of differential equations. Initial and boundary value problems. Partial differential equations (diffusion, wave, and Poisson's equation). Discrete Fourier transform and its usage in signal analysis, autocorrelation.

Temeljna literatura in viri / Readings:

- B. Plestenjak, Razširjen uvod v numerične metode, DMFA, Ljubljana, 2015, (15%).
- John H. Mathews, Kurtis D. Fink, Numerical methods using MATLAB 4th ed., Prentice Hall, 2004. (10%)
- W. H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, Numerical Recipes in C/Fortran, Cambridge University Press, Cambridge, 1994. (10%)
- E. Joseph Billo, Excel for Chemists 2nd ed., Wiley, New York 2001. (10%)
- J. Reščič in T. Urbič, Numerične metode-praktikum, FKKT, Ljubljana, 2015.

Cilji in kompetence:

Cilji: Pri predmetu naj bi študent dobil teoretično podlago in praktične izkušnje za samostojno reševanje matematično-fizikalnih problemov z različnih področij znanosti in tehnike s posebnim poudarkom na kemiji, in to z uporabo računalnika.

Kompetence: Praktično naj bi se naučil osnov

Objectives and Competences:

Objectives:

Understanding of basic methods and algorithms used in solving computational problems encountered in various fields of chemistry.

Competences: To learn basics of one of higher-level programming languages used for data

programiranja v enem izmed višjenivojskih programskih jezikov ter spoznal osnovne algoritme, ki se uporabljajo pri numeričnem reševanju raznih problemov. Seznanil pa naj bi se tudi s stanjem in problematiko numeričnega računanja na področjih, ki mejijo na kemijo.

analysis and high-performance computing. Usage of common software to present and interpret experimental data.

Predvideni študijski rezultati:

Znanje in razumevanje

Predmet je namenjen seznanjanju z osnovnimi metodami za reševanje numeričnih problemov v naravoslovju in tehniki s posebnim poudarkom na kemiji. Študent se nauči identificirati problem, ga razčleniti in potem rešiti s pomočjo računalniškega programa, ki ga skonstruira sam.

Uporaba

Uporabnost pridobljenega znanja je zelo široka in nikakor ni omejena samo na kemijo. Študent se je sposoben spoprijeti skoraj z vsakim numeričnim problemom, na katerega naleti med študijem ali pozneje, neodvisno od področja znanosti.

Refleksija

Študent pridobi občutek, da se je sposoben lotiti poljubnega numeričnega problema, za katerega še ni (ali pa ne pozna) napisanega računalniškega programa.

Prenosljive spretnosti

Spretnosti in znanje, ki si ga študent pridobi pri predmetu, so v največji meri splošne in prenosljive, uporabne na vseh področjih znanosti in tehnike, kjer so podatki in rezultati podani v numerični obliki.

Intended Learning Outcomes:

Knowledge and Comprehension

The subject is aimed toward basic numerical methods commonly used throughout various natural sciences and especially in chemistry. A student learns to identify the problem, dissect it, and solve it using a self-developer computer program or algorithm.

Application

The acquired knowledge is widely applicable and is not only chemistry-related. A student is able to solve problems encountered during the study and later, independent on the field of science.

Analysis

A student becomes confident about her/his ability to solve a given numerical problem using a computer program developer on her/his own.

Skill-transference Ability

Acquired knowledge and skills are general and can therefore be used in other scientific or technical fields where numerical data are commonly used and processed.

Metode poučevanja in učenja:

- Predavanja.
- Praktične vaje na računalniku.

Learning and Teaching Methods:

Lectures and computer lab course.

Delež (v %) /

Načini ocenjevanja:

Weight (in %) **Assessment:**

Pisni izpit. Ocene: 6-10 (pozitivno), 1-5 (negativno) ob upoštevanju Statuta UL in fakultetnih pravil.		Written exam.
---	--	---------------

Reference nosilca / Lecturer's references:

1. **REŠČIČ, J.**, LINSE, P. MOLSIM: A modular molecular simulation software. Journal of Computational Chemistry, 2015, vol. 36(16), str. 1259–1274.
2. **REŠČIČ, J.**, LINSE, P. Potential of mean force between charged colloids: effect of dielectric discontinuities. J. Chem. Phys., 2008, vol. 129(11), art. no. 114505.
3. KALYUZHNYI, Y.V., **REŠČIČ, J.**, HOLOVKO, M., CUMMINGS, P.T. Primitive models of room temperature ionic liquids. Liquid-gas phase coexistence. Journal of Molecular Liquids, 2018, vol. 270, str. 7–13.
4. BOHINC, K., **REŠČIČ, J.**, MASET, S., MAY, S. Debye-Hückel theory for mixtures of rigid rodlike ions and salt. The Journal of chemical physics, 2011, vol. 134(7), art. no. 074111.