

Mathematical and Computer Modeling in Chemistry

Professor Yehuda Band

Syllabus

(Hebrew syllabus on the next page)

Course Grading

- | | |
|-----------------------|-----|
| • Midterm exam | 30% |
| • HW and Quizzes | 30% |
| • Project | 30% |
| • Class Participation | 10% |

The “pillars” of scientific investigation are (a) experiment, (b) modeling, (c) simulation and (d) comparison with experiment and improvement of the model. This course will develop tools for modeling and simulation in chemistry. After an introduction to probability theory, statistics and error analysis [topics required for analyzing experimental data and prerequisites for quantum chemistry, quantum physics, and statistical mechanics] and some concepts in mechanics (Lagrangian, generalized momentum, phase space, Hamiltonian) [topics required for quantum chemistry and statistical mechanics], modeling and simulation methods will be addressed. Simulations will be carried out using the computer program *Mathematica*. *Mathematica* is a powerful tool for technical computing which provides a robust computing environment that is used in biology, chemistry, economics, engineering, finance, mathematics, physics, and a wide range of other fields. It is designed for symbolic as well as numerical calculations, and for visualization of technical information.

The course will include the following topics: A brief introduction to computer science and numerical methods, *Mathematica* as a sophisticated symbolic and numeric calculator programming in *Mathematica* and the concepts behind the language, procedural, functional and rule-based programming, parallel computing using multiple cores, and dynamic interfaces (animation), an introduction to probability theory and analytical mechanics. Students will solve interesting problems taken from various subfields in chemistry, with models that incorporate aspects of algebra, calculus, statistics, optimization, and data analysis. Students will complete a project that they will choose from within their own areas of interest in chemistry.

The course will consist of one hour per week lecture, one hour laboratory instruction and one hour exercises.

Course Textbooks:

- John W. Gray, *Mastering Mathematica: Programming Methods and Applications*, (Academic Press, 1997).
- Paul R. Wellin, *Programming with Mathematica, An Introduction*, (Cambridge U. Press, 2013).
- Dimitri P. Bertsekas and John N. Tsitsiklis, *Introduction to Probability* (Athena Scientific, 2008).
- Handout notes on analytical mechanics.

מידול מתמטי וממוחשב בכימיה

פרופ' יהודה בנד

סילבוס

"עמודי התווך" של כל מחקר מדעי הם: (א) ניסוי, (ב) מידול, (ג) הדמיה, (ד) השוואה עם תוצאות הניסוי תוך שיפור המודל. קורס זה יפתח כלים עבור בניית מודלים והדמיה בכימיה. לאחר הקדמה לתורת ההסתברות, סטטיסטיקה וניתוח של שגיאות [נושאים הדרושים עבור ניתוח של נתונים ניסיוניים, ומהווים קדם לכימיה קוונטית ולמכניקה סטטיסטית] ומושגים מסוימים במכניקה אנליטית (תנע, מרחב הפאזה, המילטוניאן) [נושאים הדרושים לכימיה קוונטית ולמכניקה סטטיסטית] יוצגו כלים המשמשים לבניית מודלים והדמיות. ההדמיות יבוצעו באמצעות תוכנת המחשב "Mathematica". תוכנה זו מהווה כלי רב עוצמה עבור חישובים טכניים, ומספקת סביבת מחשוב חזקה הנמצאת בשימוש בביולוגיה, כימיה, כלכלה, הנדסה, פיננסים, מתמטיקה, פיזיקה ומגוון רחב של תחומים אחרים. היא מיועדת לביצוע של חישובים סימבוליים בנוסף לחישובים מספריים, וכן להדמיה חזותית של נתונים טכניים.

הקורס יכלול את הנושאים הבאים: הקדמה קצרה למדעי המחשב, תוכנת "Mathematica" - מחשבון מתוחכם לביצוע חישובים סימבוליים ומספריים, תכנות ב"מתמטיקה" והבנת המושגים והרעיונות שבבסיס שפת התכנות. תכנות פרוצדורלי, פונקציונלי ולפי כללים, חישובים מקבילים באמצעות מספר רב של ליבות, וממשקים דינמיים (אנימציה). כמו כן יינתן מבוא לתורת ההסתברות ולמכניקה אנליטית.

הסטודנטים יפתרו בעיות מעניינות הלקוחות ממגוון של תת-נושאים בכימיה בעזרת מודלים המשלבים היבטים באלגברה, מתמטיקה שימושית, סטטיסטיקה, אופטימיזציה וניתוח נתונים. הסטודנטים יבצעו פרויקט אותו הם יבחרו מתוך תחומי העניין שלהם בכימיה.

הקורס יורכב משעת הרצאה, שעת תירגול ושעת מעבדה שבועיים.

ספרות לקורס:

John W. Gray, *Mastering Mathematica: Programming Methods and Applications*, (Academic Press, 1997).

Paul R. Wellin, *Programming with Mathematica, An Introduction*, (Cambridge U. Press, 2013).

Dimitri P. Bertsekas and John N. Tsitsiklis, *Introduction to Probability* (Athena Scientific, 2008).

Handout notes.