

TEME Laborator - Aplicatii propuse pentru Laborator

Laborator 1

Tema 1. Calcule statistice, functii matematice si statistice

a) \sum (Autosum) $\in Excel$

b) **Sum** (...) $\in Excel$

c) $f_x \in Excel$, **AVERAGE** (...) $\in Excel$,

Ref.:M, Vlada, C3-C5-Informatica.pdf, www.unibuc.ro/prof/vlada_m

- Sa se genereze intr-un tabel pe orizontala si pe verticala *serii de numere consecutive* folosind Edit \rightarrow Fill \rightarrow Series. Sa se utilizeze functiile indicate in a)-c) si sa se se verifice rezultatele.

								Suma	Verificare
1	2	3	...				20		
2									
3									
...									
20									
Media									
Verificare									

Diagram illustrating the use of Excel functions on a table of consecutive numbers (1 to 20). Callouts point to specific cells:

- \sum (Autosum) points to the 'Suma' column.
- AVERAGE () points to the 'Media' row.
- SUM () /n points to the 'Verificare' column.
- $\frac{n(n+1)}{2}$ Gauss points to the 'Verificare' column.

Tema 2. Indicatori statistici: corelatie (Pearson), covarianta, abaterea medie, deviatia standard

- Se considera datele (masuratorile) a doua variabile aleatoare X si Y, $X=(x_i)_{i=1,n}$ si $Y=(y_i)_{i=1,n}$, adica (x_i, y_i) , $i=1, \dots, n$.

$$r_{xx} = \frac{\sum (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y})}{\sqrt{(\sum (x_i - \bar{X})^2)(\sum (y_i - \bar{Y})^2)}}$$

a) folosind functia **CORREL** (X,Y) $\in Excel$, b) folosind Excel pentru calculele directe: se utilizeaza calculele intermediare (vectori),

$$A = X - \bar{X}; B = Y - \bar{Y}; C = A * B; D = A^2; E = B^2$$

c) folosind covarianta **COVAR** (X,Y), **STDEVP** (X,Y) $\in Excel$.

$$r_{XY} = \frac{Cov(X,Y)}{S_X S_Y}, Cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{n},$$

$$S_X = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}} \quad S_Y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n}},$$

unde $Cov(X,Y)$ este covarianta, S_X, S_Y sunt abaterile standard

Tema 3. Puterile lui 2: Puterile 2^k , $k > 30$. Pentru $k > 30$ să se determine numărul cifrelor și cifrele puterii 2^k (de exemplu, să se verifice ca 2^{100} are 31 de cifre și $2^{100} = 1267650600228229401496703205376$, iar 2^{1000} are 302 cifre.

a) folosind **POWER** () $\in Excel$

b) folosind <http://web2.0calc.com/> (Web 2.0 Scientific Calculator).

Laborator 2

Reprezentari grafice si rezolvarea de probleme

Tema 1. Grafice de functii folosind

1. tabelarea functiei si programul Excel
2. <http://web2.0calc.com/> (Web 2.0 Scientific Calculator)

- a) $f: [-50, 50] \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = x \cdot \sin(x)$
- b) $f: [-2, 2] \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^{-x \cdot x}$ (clopotul lui Gauss)
- c) $C_2: [0, 120] \rightarrow \mathbb{R}$,

$$C_2(t) = \frac{k_a C_0}{k_e - k_a} \left(e^{-k_d t} - e^{-k_e t} \right) \quad (\text{curba de absorbtie-eliminare in Farmacocinetica}),$$

unde $C_0 = 10$, $k_a = 0.3$, $k_e = 0.03$

1. Se genereze pentru argumentul x , respectiv t , intr-un tabel pe verticala, *serii de numere consecutive* folosind Edit \rightarrow Fill \rightarrow Series, cu pasul pas = 0.1. Se vor calcula valorile functiei in aceste valori generate, dupa care se realizeaza graficul folosind **Chart** \in Excel.

2. Comenzi pentru programul ce realizeaza reprezentari grafice - <http://web2.0calc.com/> :

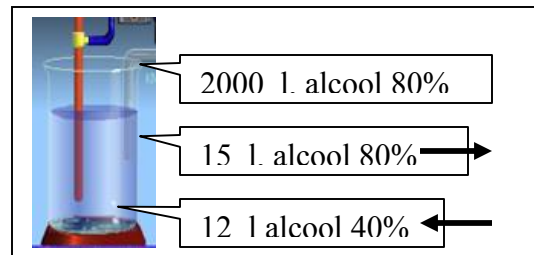
- comanda: **plot(x*sin(x),x=-50..50)**
- comanda: **plot(exp(-x*x),x=-2..2)**
- comanda: **plot((3/(0.03-0.3))*(exp(-0.3*x)-exp(-0.03*x)),x=0..120)**

Tema 2. Rezolvarea problemei lui Gauss.

Un vas conține 2000 litri dintr-un lichid cu o concentrație de 80 % alcool. În fiecare zi se scot din vas 15 litri și se înlocuiesc cu alți 12 litri dintr-un lichid a cărui concentrație în alcool este de numai 40 %. După câte zile concentrația lichidului din vas ajunge la 50 % ?

- parametrizare (constante \rightarrow variabile);
- procesul de calcul (fluxul de calcul);
- rezolvarea folosind programul Excel.

a	b	c	y0	yp	yf
2000.000	15.000	12.000	0.800	0.400	0.500
x	ycurent	z	t		
0	0.800	1600.000	2000.000		
1	0.800	1592.800	1997.000		
2	0.798	1585.636	1994.000		
3	0.795	1578.508	1991.000		
4	0.793	1571.416	1988.000		



Tema 3. Rezolvarea problemei celor n vase cu azot (Ref.:

www.unibuc.ro/prof/vlada_m/docs/2012/apr/09_22_14_22App-demo-2.doc).

- a) cazul $n=2$
- b) cazul general $n > 1$
 - parametrizare (constante \rightarrow variabile) si rationamentul de rezolvare;
 - procesul de calcul (fluxul de calcul);
 - rezolvarea folosind programul Excel.

Referinta: M. Vlada, Informatica aplicata, cap. 2 si online -

http://www.unibuc.ro/prof/vlada_m/docs/2012/ian/16_20_37_19C3-C5-Informatica.pdf

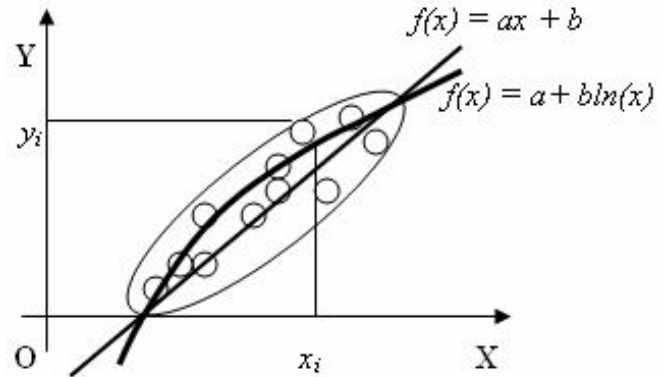
Laborator 3

Analiza datelor experimentale: procedeul de modelare

Tema 1. Modele de aproximare (liniare-dreapta de regresie, neliniare-curbe): suport teoretic

Studiul variabilei dependente Y in functie de variabila X, $Y = f(X)$, (X si Y au valori masurate), f reprezinta modelul (functie), adica functia de evolutie a lui Y fata de X.

- Tipuri de asociere a datelor masurate, tipul modelului (functiei) f: $f(x)=ax+b$ (dreapta); $f(x)=ax^2+bx+c$ (polinom gr. 2, 3, ..., 6); $f(x)=ae^{bx}$ (exponentiala); $f(x)=a+b\ln(x)$ (logaritmica).
- Suportul matematic: Metoda celor mai mici patrate (MCMMP)
- se determina coeficientii a,b, ... astfel ca suma $S = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2$ sa fie minima (valoarea minimă a pătratelor erorilor).



Tema 2. Procedeul de modelare (fitare): asocierea datelor, determinarea modelelor, comparatii

- **Pasul 1. Reprezentarea norului de puncte** (diagrama de imprastiere) pentru variabilele X si Y. Pentru acest lucru trebuie sa se selecteze valorile aflate in cele 2 coloane ale celor 2 variabile, se actioneaza **Insert** → **Chart** si se alege tipul de grafic **XY (Scatter)** (*Standard Types*), de unde din cele 5 variante de grafice se opteaza pentru prima varianta (*Scatter-Compares pairs of values*); se parcurg etapele pentru a genera graficul respectiv, si care apare mai jos;
- **Pasul 2. Determinarea si reprezentarea modelului.** Se selecteaza graficul obtinut la pasul 1 (norul de puncte) si se actioneaza **Chart** → **Add Trendline** de unde se alege tipul modelului, ex. **Linear** (*Standard Types*);
 - a) se alege modelul (se aleg pe rand toate modelele; pasul 2 se repeta plecand de la o copie a norului de puncte)
 - b) **ATENȚIE!** Eticheta **Add Trendline Options** permite definirea altor atribute ale liniei de trend:
 - **Display equation on chart** – marcarea boxei de control are efectul trecerii pe grafic a ecuației estimate,
 - **Display R-squared value on chart** – este utilă pentru afișarea coeficientului de determinare R^2 (pătratul coeficientului de corelație multiplă).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^n [E(f(x)) - f(x_i)]^2}, \text{ unde } E(f(x)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i).$$

- Sa se realizeze tema 2 pentru 2 exemple semnificative si pentru fiecare exemplu sa se compare modelele dupa criteriul coeficientului de determinare R^2 .

Referinta: M. Vlada, Informatica aplicata, cap. 2 si online -

http://www.unibuc.ro/prof/vlada_m/docs/2012/ian/16_20_37_19C3-C5-Informatica.pdf

Laborator 4

Analiza datelor experimentale: Modele de aproximare neliniare

Tema 1. Modelul logaritmic $f(x) = a + b \ln(x)$

Daca pentru variabilele X (cauza), Y (efect) se cunosc n probe (masuratori, observatii) prin valorile datelor (x_i, y_i) , $i=1, \dots, n$, modelul logaritmic $f(x) = a + b \ln(x)$ este determinat de coeficientii a si b avand urmatoarele expresii:

$$a = \frac{(\sum_{i=1}^n y_i) \sum_{i=1}^n (\ln x_i)^2 - (\sum_{i=1}^n \ln x_i) (\sum_{i=1}^n y_i \ln x_i)}{n \sum_{i=1}^n (\ln x_i)^2 - (\sum_{i=1}^n \ln x_i)^2}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \ln x_i - a \sum_{i=1}^n \ln x_i}{\sum_{i=1}^n (\ln x_i)^2} \quad \text{sau} \quad b = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - na}{\sum_{i=1}^n \ln x_i}$$

Folosind un exemplu de date pentru variabilele X si Y, sa se determine:

- Modelul si coeficientii a si b prin intermediul programului Excel: **Chart → Add Trendline**
- Direct, valorile coeficientilor a si b conform formulelor de mai sus.

Tema 2. Modelul exponential $f(x) = ae^{bx}$

Daca pentru variabilele X (cauza), Y (efect) se cunosc n probe (masuratori, observatii) prin valorile datelor (x_i, y_i) , $i=1, \dots, n$, modelul exponential $f(x) = ae^{bx}$ este determinat de coeficientii a si b avand urmatoarele expresii:

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n \ln y_i - n \sum_{i=1}^n (x_i \ln y_i)}{(\sum_{i=1}^n x_i)^2 - n \sum_{i=1}^n x_i^2} \quad \text{si } a = e^p, \text{ unde}$$

$$p = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i \ln y_i) - b \sum_{i=1}^n x_i^2}{\sum_{i=1}^n x_i} \quad \text{sau} \quad p = \frac{\sum_{i=1}^n \ln y_i - b \sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

- Folosind un exemplu de date pentru variabilele X si Y, sa se determine:

- Modelul si coeficientii a si b prin intermediul programului Excel: **Chart → Add Trendline**
- Direct, valorile coeficientilor a si b conform formulelor de mai sus.

Referinta: M. Vlada, Informatica aplicata, cap. 2 si online -

http://www.unibuc.ro/prof/vlada_m/docs/2012/ian/16_20_37_19C6-C8-Informatica.pdf

Laborator 5

Operatii matriceale, rezolvare de sisteme si ecuatii; Editarea structurilor chimice

Tema 1. Calcule matriceale, rezolvarea sistemelor si ecuatiilor

a) Operatii cu matrice $A \in M_{m,n}(R)$

- se vor utiliza functiile MDTERM (), MINVERSE (), MMULT () $\in Excel$.
- In cazul in care destinatia unui rezultat este un tablou (array), dupa scrierea formulei EXCEL, nu se executa OK, ci se utilizeaza combinatia de taste CTRL + SHIFT + ENTER.

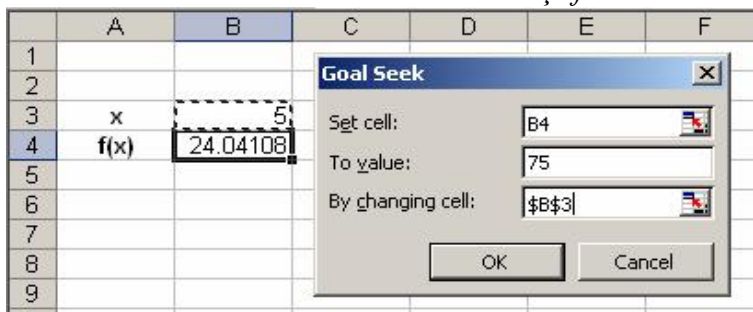
Pentru afisarea rezultatelor (tip array) se utilizeaza combinatia de taste <ctrl>+<shift>+<enter>			
1.	Calculul determinantului unei matrice - MDTERM ()		
2.	Calculul inversei unei matrice - MINVERSE ()		
3.	Calculul puterilor unei matrice - MMULT ()		
4.	Rezolvarea unui sistem linear de ecuatii - MMULT ()		

b) Rezolvarea matriceala a sistemelor liniare

Rezolvarea unui sistem linear cu 4 ecuatii si 4 necunoscute						
sistem	$A \cdot X = B$, A-matrice 4 x 4					
solutia	$X = A^{-1} \cdot B$					
Sistemul este dat de urmatoarele ecuatii:				Matricea sistemului:		
$3x - 7y + z + 5t = 2$			3	-7	1	5
$x + 4y - 11z - t = 23$		A =	1	4	-11	-1
$x - 14y - 32z + 3t = 0$			1	-14	-32	3
$12x + 4y - 3z + 9t = 13$			12	4	-3	9

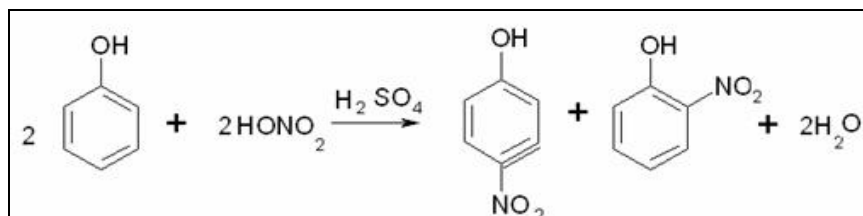
c) Rezolvarea ecuatiilor folosind **Goal Seek, Solver** $\in Excel$

Exemplu: $f(x) = 75$, unde $f(x) = x^2 + \sin(x)$. Pentru a determina o valoare a lui x când $f(x) = 75$, se va selecta **Tools** \rightarrow **Goal Seek** care va afisa fereastra **Goal Seek**.



Tema 2. Utilizarea programelor ISIS/Draw si JSDraw

- Editarea formulelor si a reactiilor chimice: Produse software: ISIS / Symyx / ChemSketch / JSDraw



Referinta: M. Vlada, Informatica aplicata, cap. 2 si online -

http://www.unibuc.ro/prof/vlada_m/docs/2012/ian/16_20_37_19C9-C10-Informatica.pdf

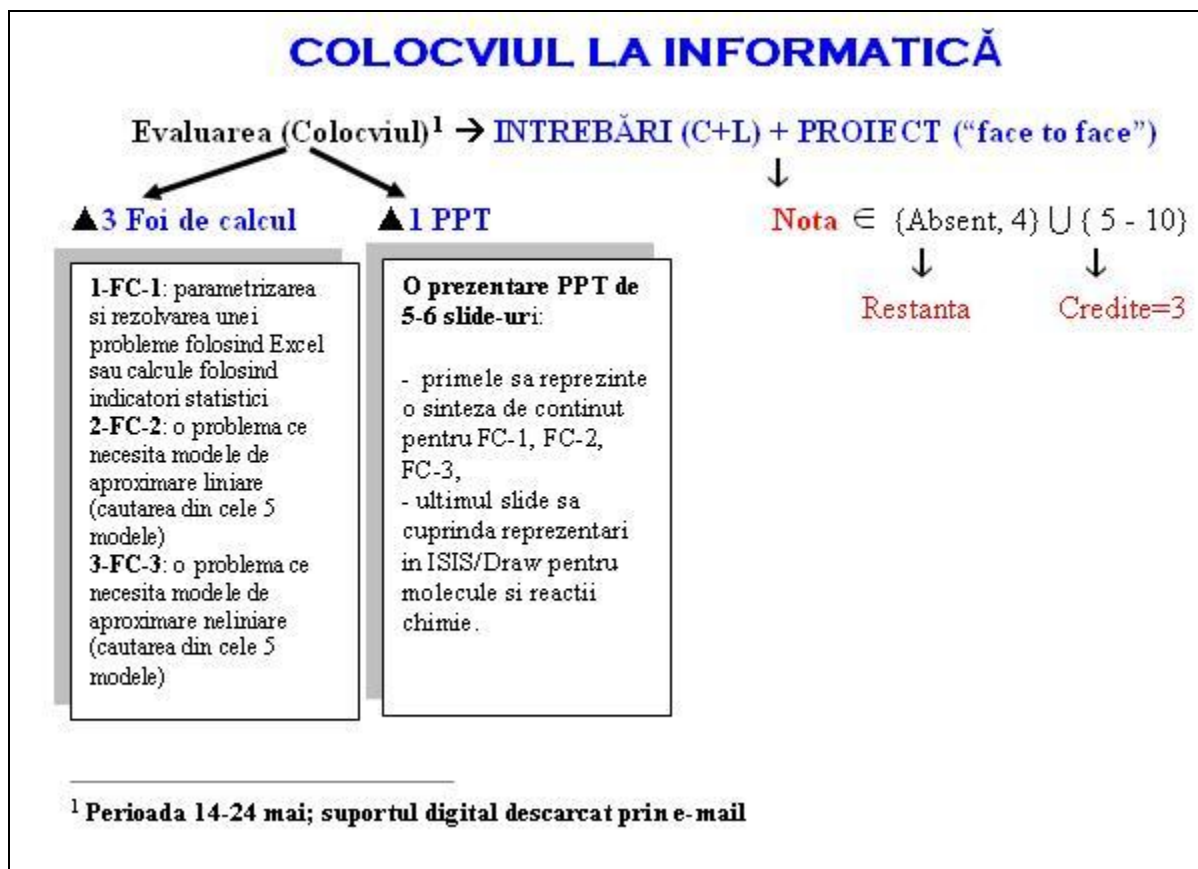
Evaluarea (Colocviul) la INFORMATICA

A) Intrebări referitoare la subiectele de la Curs + Laborator: erori si propagarea erorilor, parametrizarea si rezolvarea problemelor (Excel), metoda celor mai mici patrate (MCMMP), modele de aproximare liniare (dreapta de regresie) si neliniare, comparatia modelelor (coeficientul R^2), rezolvarea ecuatiilor, sistemelor, tabelarea functiilor si scenarii in Excel, reprezentarea moleculelor, structurilor si reactiilor chimice folosind ISIS/Draw sau JSDRaw.

B) Sustinerea si prezentarea unui Proiect ce va cuprinde (enunturi+rezolvari):

1. FC-1 (foaia de calcul 1) - parametrizarea si rezolvarea unei probleme folosind Excel sau calcule folosind indicatori statistici;
2. FC-2 (foaia de calcul 2) – o problema ce necesita modele de aproximare liniare (cautarea din cele 5 modele);
3. FC-3 (foaia de calcul 3) – o problema ce necesita modele de aproximare neliniare (cautarea din cele 5 modele);
4. O prezentare PPT de 5-6 slide-uri, primele sa reprezinte o sinteza de continut pentru FC-1, FC-2, FC-3, iar ultimul slide sa cuprinda reprezentari pentru molecule si reactii chimie folosind ISIS/Draw sau JSDraw.

OBSERVATIE: Continutul digital al proiectului se va descarca prin e-mail la Laboratorul de informatica.



În loc de concluzii !

- CE ÎNVĂȚĂM ?
- CUM ?
- CÂT ?
- PENTRU CINE ?
- UNDE ?
- CÂND ?
- CU CE ?
- CU CINE ?
- DE CE ?



Învățare superficială vs. Învățare profundă