



STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Skaitiniai algoritmai	

Anotacija
Šis kursas skirtas fizikos ir kitų fizinių mokslų krypties studentams, siekiantiems susipažinti su dažniausiai naudojamais skaičiuojamosios matematikos metodais bei algoritmais ir išmokti taikyti juos asmeninių studijų ar mokslinio darbo metu kylantiems skaičiavimų uždaviniams spręsti. Kurso metu aptariami bendrieji skaičiavimų dvejetainiais kompiuteriais ypatumai (skaičių formatai, paklaidų valdymas, duomenų generavimas, jų statistiniai įverčiai) ir pristatomi pagrindiniai tiesinės algebros, optimizavimo, integravimo, diferencijavimo bei spektrinės analizės algoritmai.

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: dr. Stepas Toliautas	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji (bakalauro studijos)	Pasirenkamasis

Įgyvendinimo forma	Vykdyimo laikotarpis	Vykdyimo kalba (-os)
Auditorinė	Rudens (3) semestras	Lietuvių

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: Programavimo įvado, aukštosios matematikos kursai	Gretutiniai reikalavimai (jei yra): rekomenduojamas matematinės fizikos kursas

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	140 val.	64	76

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos		
Supažindinti su fizinių mokslų uždavinių sprendimo naudojant kompiuterius metodais ir algoritmais, ugdyti tiriamosios veiklos kompetencijas remiantis informacinėmis technologijomis.		
Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Studentai įgis bazinių žinių apie metodus ir algoritmus, naudojamus spręsti fizinių ir technologijos mokslų srities uždavinius kompiuteriais.	* Aiškinamasis ir probleminis dėstymas, demonstravimas; * kodo analizė.	Egzaminas (klausimai ir užduotys raštu), kartojimo užduotys
Studentai gebės taikyti skaitinius metodus tipiniams uždaviniams spręsti, naudodami egzistuojančią arba savarankiškai sukurtą programinę įrangą.	Aktyvus mokymasis: prižiūrimas ir savarankiškas užduočių sprendimas.	Namų užduotys

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Užduotys
1. Skaičių atvaizdavimas kompiuteryje. Dvejetainiai duomenys. Slankaus kablelio skaičiai, <i>IEEE 754</i> standartas. Apvalinimo ir diskretizavimo paklaidos. Skaitinis stabilumas.	2			2			4	4	
2. Interpoliavimas. Lagranžo daugianariai. Intervalų (lokalus) interpoliavimas: tiesės atkarpos, Hermito daugianariai, splineai, Bezier kreivės.	2			2			4	4	
3. Statistiniai įverčiai. Atsitiktinės ir sisteminės paklaidos. Centriniai momentai. Gauso skirstinys, mažiausių kvadratų lygtys. Modelio tinkamumas.	2			2			4	4	
4. Atsitiktiniai skaičiai. Atsitiktinumo sąvoka. Pseudoatsitiktiniai skaičiai: tolydinis, Gauso, kiti skirstiniai. Pseudoatsitiktinių skaičių generavimas. Atsitiktinių skaičių taikymai: kriptografija, maišos funkcijos, Monte Carlo metodai.	2			2			4	4	
5. Tiesinių lygčių sistemos. Lygčių sistemos matricinis vaizdavimas. Sistemų sprendimas Gauso-Žordano ir LU dekompozicijos metodais. Singuliarių verčių dekompozicija. Įstrižainės ir praretintos matricos. Tikrinės vertės ir tikriniai vektoriai. Simetrinės ir ermitinės matricos. Diagonalizavimas.	4			4			8	8	
6. Algebrinių lygčių sprendimas. Lygties nuliai/šaknys. Pusiaukirtos, kirstinių, Niutono- Rapsono metodai. Daugianarių šaknys. Netiesinių lygčių sistemos.	3			3			6	6	

7. Ekstremumų paieška. Ekstremumai ir ypatingi taškai. Įrėminimas, aukso pjūvio, Brent metodai. Daugiamatčių funkcijų optimizavimas: simpleksų metodas, kryptinė paieška, gradientų ir kvazi-Niutono metodai. Modelinis atkaitinimas.	4			4			8	8	Namų užduotys, kartojimo užduotys
8. Skaitinis integravimas. Kvadratūros: trapecijų, Simpsono formulės. Rombergo integravimas. Gauso kvadratūros. Adaptyvus integravimas. Ypatingi integralų taškai, daugialypiai integralai.	3			3			6	6	
9. Diferencialinių lygčių sprendimas. Skaitinės išvestinės. Baigtinių skirtumų metodai, Runge ir Kutta formulės. Žingsnio keitimo algoritmas. Ekstrapoliaciniai ir slenkančių pataisų metodai. Kraštinių sąlygų lygtys: taikinio ir relaksaciniai metodai. Lygtys su dalinėmis išvestinėmis: sprendimo schemas, von Neumann stabilumo kriterijus.	6			6			12	12	
10. Furjė analizė. Laikinis ir dažninis atvaizdžiai. Diskretiniai duomenys, Nyquist teorema, diskrečioji Furjė transformacija. Sparčioji Furjė transformacija. Furjė analizės taikymai: dažnių filtrai, sąsūka, triukšmų filtrai. Kiti spektriniai metodai.	4			4			8	8	
11. Pasirengimas egzaminui.								12	
Iš viso	32			32			64	76	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Kartojimo užduotys	10	Paskaitų ir pratybų metu	Įvertinimas yra teisingai atliktų užduočių dalis.
Namų užduotys: programų kodas	20	Semestro metu, sutartais terminais	<i>Kiekvienai užduočiai/ jos daliai, vertinamai 1 tašku:</i> atlikta teisingai ir veikia – 1 taškas, veikia ne visais atvejais arba yra klaidų – 0,5 taško, neveikia arba neatlieka užduoties – 0 taškų. Įvertinimas yra atskirų užduočių taškų suma.
Egzaminas ir tarpinis atsiskaitymas: klausimai ir užduotys raštu.	40 30	Sesijos metu Semestro viduryje	Atviro tipo klausimai, ~15 taškų. Vertinimas: 13+ taškų – 4 balai. Puikios žinios ir jų taikymas. 10–12 taškų – 3,2 balo. Geros žinios, yra klaidų. 7–9 taškai – 2,4 balo. Vidutinės, nesusietos žinios. 4–6 taškai – 1,6 balo. Minimalios žinios/ gebėjimai. 1–3 taškai – 0,8 balo. Trūksta minimalių žinių. Neatsiskaityta – 0 balų.

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
Privaloma literatūra				
Ž. Kancleris	2005	Programavimo kalbos ir skaičiavimų receptai II: skaitmeniniai metodai		Ciklonas (<i>Vilnius</i>)
R. Čiegis, V. Būda	1997	Skaičiuojamoji matematika		TEV (<i>Vilnius</i>)
C. B. Moler	2004	Numerical Computing with <i>MATLAB</i>		SIAM (<i>Philadelphia</i>)
Papildoma literatūra				
W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery	2007	Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing	3 leidimas	Cambridge University Press (<i>New York</i>)
J. D. Faires, R. L. Burden	2002	Numerical Methods	3 leidimas	Brooks/Cole (<i>Pacific Grove</i>)
M. T. Heath	1997	Scientific Computing: An Introductory Survey		McGraw-Hill (<i>New York</i>)



COURSE UNIT DESCRIPTION

Course unit title	Code
Numerical algorithms	

Annotation
<p>This course is aimed at students of physics and physical sciences that seek to learn the most common numerical computation methods and to start applying them to solve the everyday mathematical problems of physical sciences and technology. The course material will discuss the peculiarities of binary numerical computations (number formats, error limiting, data generation, statistical analysis) and present the basic algorithms of linear algebra, optimization, integration, differentiation and spectral analysis.</p>

Lecturer(s)	Department, Faculty
Coordinating: Dr. Stepas Toliautas	

Study cycle	Type of the course unit
First cycle (bachelor studies)	Optional

Mode of delivery	Semester or period when it is delivered	Language of instruction
Contact (on-site)	Autumn (3rd) semester	Lithuanian

Requisites	
Prerequisites: Introductory programming and calculus courses	Co-requisites (if relevant): Mathematical physics course is recommended

Number of ECTS credits allocated	Student's workload (total)	Contact hours	Individual work
5	140 hrs.	64	76

Purpose of the course unit: programme competences to be developed		
To get students acquainted with the computational methods and algorithms used for solving problems in physical sciences, to acquire competences in research, critical thinking and application of information technologies.		
Learning outcomes of the course unit	Teaching and learning methods	Assessment methods
Students will have understanding of the computational methods and algorithms used to solve problems in fields of physical sciences and technology.	* Lectures; * code reviews; * case studies.	Written exam, answers to review questions
Students are expected to formulate and solve basic mathematical problems of physical sciences using numerical methods.	Guided and independent problem solving	Home assignments

Course content: breakdown of the topics	Contact hours						Individual work: time and assignments		
	Lectures	Tutorials	Seminars	Workshops	Laboratory work	Internship/work placement	Contact hours	Individual work	Assignments
1. Computing. Binary data formats. Floating-point numbers, <i>IEEE 754</i> standard. Round-off and truncation errors. Numerical stability.	2			2			4	4	
2. Interpolation. Lagrange polynomials. Local interpolation: linear, cubic (Hermite), spline, Bezier curves.	2			2			4	4	
3. Statistical inference. Random and systemic errors. Distributions, central moments. Gaussian distribution, least-squares method. Goodness-of-fit.	2			2			4	4	
4. Random numbers. True and local randomness. Pseudo-random numbers: uniform, normal, arbitrary distribution. Random number generators. Random number applications: cryptography, hashing, Monte-Carlo methods.	2			2			4	4	
5. Systems of linear equations. Matrix representation. Solving systems of linear equations: Gauss-Jordan elimination, <i>LU</i> decomposition. Singular value decomposition. Sparse matrices. Eigenvalues, eigenvectors. Symmetric matrices. Diagonalization.	4			4			8	8	
6. Algebraic equations. Equation roots and zeros. Bisection, secant, Newton-Raphson methods. Polynomial roots. Systems of non-linear equations.	3			3			6	6	

7. Function optimization. Extrema and transition points. Bracketing, golden section, Brent algorithm. Multivariate search: downhill, conjugate gradient, quasi-Newton methods. Simulated annealing.	4			4			8	8	Home assignments, review questions
8. Numerical integration. Quadratures: trapezoid, Simpson integration rules. Romberg integration. Adaptive algorithms. Singularities and infinities. Multidimensional integrals.	3			3			6	6	
9. Numerical solutions of differential equations. Numerical derivatives. Initial conditions: finite difference methods, Runge-Kutta formulas. Adaptive step size methods. Extrapolation and predictor-corrector methods. Boundary conditions: shooting, relaxation. Partial differential equations: difference schemas, von Neumann stability.	6			6			12	12	
10. Fourier analysis. Time and frequency domain. Discrete data, Nyquist theorem, discrete Fourier transform. Fast Fourier transform. Applications: frequency shaping, convolution, noise filtering. Other spectral methods.	4			4			8	8	
11. Course review before examination(s).								12	
Total	32			32			64	76	

Assessment strategy	Weight, %	Deadline	Assessment criteria
Subject reviews	10	Each week	Final grade is a percentage of correct answers.
Home assignments: coding exercises	20	Based on set schedule	<i>For each partial exercise worth 1 point:</i> correct solution – 1 point, partial solution – 0,5 point, incorrect/ no solution – 0 points. Final grade is a sum of all exercise grades.
Written exam and midterm exam	40 30	Exam period Midterm	Open questions, ~15 total points. Grading: 13+ points – grade is 4. Excellent knowledge and use. 10–12 points – grade is 3,2. Good recall, some mistakes. 7–9 points – grade is 2,4. Mediocre knowledge and use. 4–6 points – grade is 1,6. Minimal or partial recall. 1–3 points – grade is 0,8. Unsatisfactory performance. 0 points – absent.

Author	Publishing year	Title	Edition, issue or volume no.; required pages	Publishing house or internet site
Compulsory reading				
Ž. Kancleris	2005	Programavimo kalbos ir skaičiavimų receptai II: skaitmeniniai metodai (for English, cf. Press et al.)		Ciklonas (Vilnius)
R. Čiegis, V. Būda	1997	Skaičiuojamoji matematika (Lithuanian only)		TEV (Vilnius)
C. B. Moler	2004	Numerical Computing with <i>MATLAB</i>		SIAM (Philadelphia)
Additional reading				
W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery	2007	Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing	3rd edition	Cambridge University Press (New York)
J. D. Faires, R. L. Burden	2002	Numerical Methods	3rd edition	Brooks/Cole (Pacific Grove)
M. T. Heath	1997	Scientific Computing: An Introductory Survey		McGraw-Hill (New York)