

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Metody numeryczne
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot	Wydział Chemii
Język przedmiotu	Polski
Efekty kształcenia dla przedmiotu ujęte w kategoriach: wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych	<p>W zakresie wiedzy: Doktorant rozumie założenia i zna główne pojęcia matematycznych metod stosowanych do analizy wyników eksperymentu w chemii; Zna zakres zastosowań i ograniczenia tych metod; Zna podstawowe oprogramowanie komputerowe używane do obliczeń oraz narzędzia umożliwiające tworzenie własnych aplikacji.</p> <p>W zakresie umiejętności: Doktorant dobrać właściwe narzędzia matematyczne do rozwiązania konkretnego problemu; Potrafi ocenić wiarygodność i dokładność uzyskanych wyników. Potrafi zbudować własne narzędzia obliczeniowe korzystając z bibliotek matematycznych i dostępnych programów i języków programowania.</p> <p>W zakresie kompetencji: Doktorant ma świadomość ograniczeń narzucanych przez poszczególne metody obliczeniowe i konieczność weryfikacji wyników; Ma świadomość rozwoju metod matematycznych i oprogramowania komputerowego i konieczność aktualizacji wiedzy</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Obowiązkowy
Semestr/rok	1 i 2/I 3/II
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Andrzej Eilmes
Imię i nazwisko osoby/osób egzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot	
Sposób realizacji	Wykład i ćwiczenia
Wymagania wstępne i dodatkowe	Zaliczony kurs matematyki; znajomość rachunku różniczkowego i całkowego oraz algebry macierzy
Liczba punktów ECTS przypisana przedmiotowi	7 ECTS
Bilans punktów ECTS	30 godzin – udział w wykładach 30 godzin – ćwiczenia 90 godzin - studiowanie literatury i praca własna 60 godzin – przygotowanie mini projektów

Stosowane metody dydaktyczne	Metody podające – wykład informacyjny Metody problemowe – wykład problemowy Ćwiczenia laboratoryjne
Metody sprawdzania i oceny efektów kształcenia uzyskanych przez doktorantów	Wykonanie dwóch miniprojektów (jeden po 1 semestrze, drugi na zakończenie kursu) Bieżąca kontrola postępów podczas ćwiczeń.
Forma i warunki zaliczenia przedmiotu, w tym zasady dopuszczenia do egzaminu, zaliczenia, a także forma i warunki zaliczenia przedmiotu	Ocena jest średnią oceną obu wykonywanych miniprojektów. Wykonane miniprojekty są prezentowane przez autorów, wymagane jest uzasadnienie wyboru narzędzi matematycznych i oprogramowania oraz omówienie sposobu weryfikacji poprawności uzyskanych wyników.
Treści przedmiotu*	Interpolacja wielomianowa, funkcje sklepane, techniki aproksymacji i optymalizacji, w tym metoda algorytmów genetycznych, całkowanie i różniczkowanie numeryczne, rozwiązywanie równań i układów równań różniczkowych zwyczajnych, elementy algebry liniowej, przybliżone rozwiązywanie równań nieliniowych, Oprogramowanie do obliczeń numerycznych na przykładzie języka R oraz obliczeń symbolicznych na przykładzie programu Maxima. Narzędzia do wizualizacji wyników (R, gnuplot). Korzystanie z bibliotek oprogramowania matematycznego na przykładzie pakietów języka R i bibliotek matematycznych (Netlib)
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	J. Stoer, R. Bulirsch, <i>Wstęp do analizy numerycznej</i> , PWN, Warszawa 1987 G. Dahlquist, A. Björck, <i>Metody numeryczne</i> . PWN, Warszawa 1987 W. H. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B. P. Flannery, <i>Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing</i> , Cambridge University Press 2007 P. Biecek, <i>Przewodnik po pakiecie R</i> , wyd. Gis 2011

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.