

GUIA DOCENT

1. Identificació de l'assignatura.

Nom: Càlcul Numèric

Codi: 28010

Crèdits: 9

Tipus: Troncal

2. Objectius de l'assignatura.

A l'assignatura de Càlcul Numèric s'estudiaran mètodes numèrics per a resoldre alguns dels problemes bàsics que s'acostumen a presentar en el càlcul científic com poden ser, la resolució de sistemes d'equacions, l'aproximació mínim quadràtica o la resolució d'equacions diferencials ordinàries.

L'objectiu de l'assignatura és que l'estudiant conegui aquests mètodes des del seu fonament matemàtic, estudiant les propietats de convergència i estabilitat i l'estimació dels errors, fins a la seva aplicabilitat i possibles limitacions.

Les pràctiques amb ordinador tindran un pes important en aquesta assignatura. L'objectiu és que les pràctiques siguin un complement per entendre millor els mètodes numèrics. En aquest sentit, les pràctiques permeten posar de manifest en diferents exemples, les propietats de convergència i estabilitat estudiades analíticament en les classes de teoria i de problemes. També serviran per comparar diferents mètodes per resoldre un mateix problema.

3. Continguts.

(1) Aproximació de funcions

- (a) APROXIMACIÓ MÍNIM QUADRÀTICA
 - Casos continu i discret.
 - Equacions normals.
- (b) FAMÍLIES DE POLINOMIS ORTONORMALS
 - Existència i propietats.
 - Polinomis de Legendre i Chebyshev.
 - Aplicació: Fórmules d'integració gaussianes.
- (c) INTERPOLACIÓ TRIGONOMÈTRICA
 - Transformada ràpida de Fourier.

(2) Solució numèrica de sistemes d'equacions

- (a) MÈTODES ITERATIUS PER SISTEMES LINEALS
 - Normes matricials.
 - Mètodes iteratius lineals. Convergència i estimació de l'error. Mètodes de Jacobi, de Gauss-Seidel i de relaxació.
 - Mètode del gradient i del gradient conjugat.

- (b) CÀLCUL DE VALORS I VECTORS PROPIS
- Localització geomètrica de valors propis. Teorema de Gershgorin.
 - Mètode de la potència i de la potència inversa desplaçada.
 - Mètode QR. Reducció d'una matriu a forma de Hessenberg. La iteració QR per a una matriu en forma de Hessenberg.
- (c) SISTEMES D'EQUACIONS NO LINEALS
- Mètodes de punt fix: convergència i estimació de l'error.
 - Mètode de Newton. Mètodes de Newton modificats.
 - Mètodes de continuació.

(3) Solució numèrica d'equacions diferencials

- (a) PROBLEMA DE VALOR INICIAL PER EQUACIONS DIFERENCIALS ORDINÀRIES
- Mètodes d'un pas. Convergència. Derivació dels mètodes de Taylor i de Runge-Kutta.
 - Mètodes de multipàs. Consistència, estabilitat i convergència. Derivació dels mètodes d'Adams. Mètodes predictor-corrector.
 - Regió d'estabilitat absoluta.
 - Problemes stiff. Mètodes BDF i Runge-Kutta implícits.
- (b) PROBLEMES DE VALORS A LA FRONTERA PER EQUACIONS DIFERENCIALS ORDINÀRIES
- Mètode de tir, simple i paral·lel.
 - Mètodes de diferències finites.

4. Temps que ha de dedicar l'alumne per tal de superar l'assignatura.

TIPUS D'ACTIVITAT	Descripció	Hores
ACTIVITATS PRESENCIALS	Classes de teoria	39
	Classes de problemes	13
	Classes de pràctiques	12
	Activitats tutoritzades	13
	Realització de proves parcials	0
	Realització d'exàmens finals	8
ACTIVITATS NO PRESENCIALS	Estudi de teoria	50
	Realització de problemes	20
	Recerca Bibliogràfica	8
	Preparació de pràctiques	24
	Preparació de treballs	10
	Preparació d'exàmens	12
	TOTAL	209

5. Capacitats o destreses a adquirir.

- Capacitats a adquirir sobre els mètodes numèrics estudiats en el curs:
 - Conèixer la fonamentació matemàtica dels mètodes.
 - Capacitat per generar o construir els diferents mètodes.

- Distingir els diferents tipus d'errors introduïts per un mètode i saber com estimar-los.
- Conèixer criteris de convergència per als mètodes de tipus iteratiu.
- Entendre les nocions de consistència, estabilitat i convergència per als mètodes de resolució de problemes de valor inicial.
- Saber comparar diferents mètodes per resoldre un mateix problema.
- Capacitats a adquirir sobre la resolució de problemes:
 - Habilitat per elegir el(s) mètode(s) numèric(s) més adient(s) per resoldre un problema donat.
 - Suficient destresa per implementar aquests mètodes de la forma més eficient.
 - Donar criteris pràctics d'aturada d'iteracions per tal d'obtenir una precisió fixada.
 - Suficient criteri per detectar resultats erronis i capacitat per trobar l'origen dels errors (problema mal condicionat, mètode no adequat per al problema considerat, inestabilitat numèrica, etc.) i corregir-los.

6. Requisits previs.

És fortament recomanable haver superat les assignatures següents: Introducció a l'Àlgebra Lineal, Anàlisi Matemàtica I i II, Mètodes Numèrics, Models amb Equacions Diferencials i Equacions Diferencials.

Tanmateix és imprescindible disposar de la suficient destresa en la programació en C o FORTRAN, per a la implementació de mètodes numèrics bàsics.

7. Metodologia.

Aquesta assignatura té 3 hores setmanals de teoria i una de problemes. A més hi haurà sis sessions de dues hores de pràctiques al llarg del quadrimestre.

A les classes de teoria s'introduiran els diversos mètodes numèrics i s'estudiaran les propietats bàsiques d'aquests mètodes.

Les classes de problemes es dedicaran a la resolució de problemes de caràcter teòric i/o que requereixin l'ús d'una calculadora. Es treballarà sobre llistes de problemes que s'aniran proporcionant a l'alumne al llarg del quadrimestre.

A les sessions de pràctiques l'alumne haurà de resoldre determinats problemes numèrics amb l'ajut de l'ordinador. Aquestes sessions tindran lloc a l'aula d'informàtica de la Facultat. L'alumne disposarà d'una guia sobre el treball que haurà de realitzar a cada sessió i que consistirà en: la implementació d'alguns dels mètodes estudiats i la seva utilització per a resoldre els problemes proposats. El llenguatge de programació haurà de ser C o FORTRAN. Es recomanable un mínim treball previ a cada sessió per part de l'alumne. La "preparació" previa del codi a implementar farà més profitoses les sessions de pràctiques.

El dia de l'exàmen l'alumne haurà d'entregar els programes o codis realitzats a cada pràctica així com un *informe de pràctiques*. Aquest informe haurà de contenir:

- (1) Descripció dels mètodes implementats.
- (2) La solució dels problemes proposats a cada pràctica.

Es valoraran també els comentaris de l'alumne sobre els punts (1) i (2) (utilitat dels mètodes, dificultats trobades en la seva implementació, bondat de les solucions obtingudes, adequació dels mètodes als problemes considerats, etc).

Es recomana fortament l'assistència a les classes de problemes i de pràctiques.

El material docent relatiu a aquesta assignatura es subministrarà a través del Campus Virtual.

8. Avaluació.

La part teòrica de l'assignatura s'avaluarà amb un *exàmen de tota la matèria* a final del quadrimestre.

Per avaluar la part pràctica es realitzarà un *exàmen de pràctiques* i es valorarà també l'*informe de pràctiques*. La nota de pràctiques es donarà entre 0 i 10 i haurà de ser més gran o igual que 5 per aprovar les pràctiques.

La qualificació final s'obtindrà de ponderar al 80 % la part teòrica i al 20 % la part pràctica sempre que les pràctiques estiguin aprovades. Si no s'han aprovat les pràctiques l'assignatura es considerarà suspesa.

Els dos exàmens (teòric i pràctic) es faran el mateix dia.

9. Bibliografia.

1. A. Aubanell, A. Benseny i A. Delshams, *Eines bàsiques de càlcul numèric*, Manuals de la U.A.B., 1991.
2. R. L. Burden i J.D. Faires, *Análisis Numérico*, Grupo Editorial Iberoamérica, México D.F., 1985.
3. D. Kincaid i W. Cheney, *Análisis Numérico*, Addison-Wesley Iberoam., 1994.
4. W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling i B. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge Univ. Press, 1997.
5. A. Quarteroni, R. Sacco i F. Saleri, *Numerical Mathematics*, TAM, Springer, 2000.
6. J. Stoer i R. Burlisch, *Introduction to numerical analysis*, Springer, 1980.

Els llibres 2., 3., 5. i 6. de la bibliografia són referències bàsiques d'Anàlisi Numèrica on es tracten els diferents temes del curs. Per a la fonamentació matemàtica dels mètodes es recomanen especialment els llibres de "Quarteroni i al." i "Stoer i al." ja que a cadascun d'ells s'hi pot trobar gairebé tot el contingut de l'assignatura en un nivell similar al que es farà el curs. També es poden trobar alguns exercicis de tipus més aviat teòric.

A les referències 2. i 3. hi ha unes bones col·leccions d'exemples i de problemes proposats, de tipus més pràctic a 2. i més teòric a 3. Al llibre d'"Aubanell i al."

també es pot trobar un bon nombre de problemes resolts i proposats referents als apartats 1a, 1b, 2a i 2b del temari del curs.

El llibre de “Press i al.” és pot considerar un manual dels mètodes numèrics més utilitzats. Per a cada mètode es fa una breu exposició i es presenta la implementació de l'algorisme. Pot ser útil per a la preparació de les pràctiques.

10. Professorat.

- Teoria: Regina Martínez, C1/-158, reginamb@mat.uab.es
 - Problemes: Josep Maria Mondelo, C1/310, jmm@mat.uab.es
 - Pràctiques: Santiago Egido, segido@mat.uab.es
- Joan Torregrosa, C1/310, torre@mat.uab.es