

Assignatura : MÈTODES CÀLCUL NUMÈRIC

Codi	Tipus	Curs/semestre	Crèdits
20373	• Semestral	4rt / 2on	5

Professorat

Nom	Dpt/Unitat	Despatx	Adreça d'e-mail	Telèfon
Joan C. Artés	Matemàtiques	C1/122	artés@mat.uab.cat	581.15.05
Jaume Llibre	Matemàtiques	C1/222	jllibre@mat.uab.cat	581.13.03
Magdalena Cauberg	Matemàtiques	C1/-130	leen@mat.uab.cat	581.25.34
Lluís Bacardit	Matemàtiques	CB/013	lluisbc@mat.uab.cat	581.37.42
David Romero	Matemàtiques	CB/004	dromero@mat.uab.cat	581.37.40
Adam Mahdi	Matemàtiques	C1/-166	mahdi@mat.uab.cat	581.35.86

Objectius

A l'assignatura de Mètodes 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, calcular la solució d'equacions no lineals, la resolució de sistemes d'equacions lineals o el càlcul d'àrees delimitades per corbes de difícil integració.

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. Cal tenir en compte que la majoria d'exemples es plantejaran d'un nivell molt senzill per tal de poder ser fets a mà o amb una simple calculadora, però que els problemes reals acostumen a ser d'un ordre de magnitud molt superior i no es poden fer sense l'ajut d'un ordinador, i és allà on es produeixen més clarament els fenòmens que es descriuran a teoria.

Un no pot programar allò que no sap fer a mà. Per tant, el procediment habitual és entendre primer el mètode a teoria, després fer un parell d'exercicis a mà o amb calculadora per tal de dominar l'algoritme, i finalment fer un programa amb el que abordar problemes de més alta magnitud. És per això que tenen la mateixa importància les classes de teoria, problemes i pràctiques.

- 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.
- Saber comparar diferents mètodes per resoldre un mateix problema.
- 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.

És fortament recomanable haver superat les assignatures següents: Àlgebra Lineal, Càlcul i Anàlisi Matemàtica.

Tanmateix és imprescindible disposar de la suficient destresa en la programació en Maple, per a la implementació de mètodes numèrics bàsics. També és molt recomanable certs dominis d'Excel per tal de realitzar els càlculs més simples i petites iteracions de forma més eficaç que amb una calculadora i sense tenir la necessitat de recórrer a un llenguatge de més alt nivell. Tot i que no és tocarà durant el curs, s'entén que tots els alumnes dominen perfectament algun llenguatge d'alt nivell com el FORTRAN o el C.

(T: teoria, S: problemes o seminaris, PS: preparació de problemes o seminaris, L: laboratoris, PP: preparació pràctiques, E: estudi, AA: altres activitats; totes aquestes activitats es demanen especificades en hores)

1. APLICACIONS A L'ÀLGEBRA LINEAL	T	S	PS	L	E	PP	AA	Total
	6	3	3	2,5	11	2	0	27,5

Mètodes Gaussians. Descomposició LU.
 Eliminació Gaussiana amb pivotatge.
 Mètodes iteratius: Jacobi i Gauss-Seidel.
 Valors i vectors propis. Mètode de la potència i potència inversa.

2. RESOLUCIÓ D'EQUACIONS NO LINEALS	T	S	PS	L	E	PP	AA	Total
	7	3	3	2,5	13	2	0	30,5

Mètode de Newton.
 Comentaris sobre Txeboxev, Muller, Secant...
 Ordre de convergència d'un mètode.
 Teorema de Sturm.

3. APROXIMACIÓ DE FUNCIONS	T	S	PS	L	E	PP	AA	Total
	4	2	2	2,5	8	2	0	20,5
Interpolació Polinomial. Fórmules de Lagrange, Newton i Hermite. L'error en la interpolació polinomial. Interpolació Spline. Splines cúbics naturals. Aproximació trigonomètrica. Fast Fourier Transform.								

4. INTEGRACIÓ NUMÈRICA	T	S	PS	L	E	PP	AA	Total
	6	3	3	2,5	11	2	0	27,5
Fórmules de Newton--Côtes. Regles del trapezi i Simpson. Fórmules compostes. Mètode de Romberg. Altres fórmules de quadratura.								

5. ERRORS	T	S	PS	L	E	PP	AA	Total
	3	2	2	2,5	6	2	0	17,5
Fonts d'error. Representació numèrica sobre ordinadors. Representació en punt flotant. Truncament i arrodoniment. Propagació dels errors en les dades i en els càlculs. Nombre de condició d'un problema.								

Metodologia docent

Aquesta assignatura té 2 hores setmanals de teoria i una de problemes. A més hi haurà sis sessions de dues hores i mitja de pràctiques al llarg del quadrimestre.

El grup de teoria sota la tutoria de Magdalena Cauberg es farà en anglès. Per tal de facilitar la mobilitat de grups, totes les classes de problemes i pràctiques es faran en castellà/català. De totes maneres i per tal de complir amb la normativa referent a les classes en anglès, es proporcionarà els problemes, les pràctiques i els exàmens en anglès als alumnes que optin per aquesta via.

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. És imprescindible portar una calculadora a aquestes classes.

A les sessions de pràctiques l'alumne haurà de resoldre determinats problemes numèrics amb l'ajut de l'ordinador. Aquestes sessions tindran lloc als laboratoris integrats de l'Escola. 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. En una primera sessió es farà un repàs del llenguatge Maple. En les altres cinc pràctiques es proposaran alguns mètodes dels tractats a classe de teoria i problemes per tal de ser implementats en llenguatge Maple.

Es recomana fortament l'assistència a les classes de problemes i de pràctiques. De fet, l'assistència a les sessions pràctiques serà obligatòria en els termes que es descriu a la secció "Avaluació".

El material docent relatiu a aquesta assignatura es subministrarà a través del Campus Virtual i de la pàgina web del professor Joan C. Artés.

Pràctiques

Per tal de forçar l'estudi continuat de la matèria i evitar deixar la seva assimilació pel final, cosa que acostuma a ser molt poc eficient, es promourà l'aprenentatge continu per mitjà de les classes de problemes i de pràctiques.

En les classes de pràctiques es resoldran per mitjà de ordinadors i programes, alguns exercicis dels explicats a teoria i resolts a problemes. Donat que primer cal que l'alumne hagi entès i resolt algun d'aquests problemes abans de fer la pràctica, serà condició indispensable per accedir a la sessió de pràctiques, la presentació d'un problema concret resolt que es proposarà en les classes de problemes i que serà convenient publicat a la web. Sense aquest problema fet pel propi alumne, no es podrà accedir a la pràctica. Un cop a l'aula, els alumnes hauran de programar allò mateix que abans han fet a mà (o amb calculadora) i algun altra problema de major dificultat que ja ni tan sols seria plantejable de fer a mà. Aquests programes s'entregaran al final de la pràctica al professor.

L'entrega del problema d'accés junt amb la pràctica adequadament realitzada comportarà la nota de pràctiques. La primera sessió de pràctiques de les sis previstes no seguirà aquest format doncs es farà un repàs del llenguatge MAPLE. Per tant, l'avaluació es farà sobre un total de 5 problemes i pràctiques.

Els alumnes que no puguin accedir a la seva sessió prevista, poden canviar de grup previ avís als professors afectats. Hi hauran 10 grups diferents pel que les disponibilitats d'assistència son molt grans.

En cas de que un alumne falti a una sessió, no es valorarà i per tant la seva nota de pràctiques no podrà passar de 8. Si falta a més d'una sessió, no es podrà presentar a l'examen de juny.

Per a recuperar les pràctiques de cara a setembre es proposaran cinc nous problemes i els seus corresponents programes que seran equivalents als proposats durant el curs. Els problemes i programes a entregar al setembre seran sempre els nous proposats per l'estiu, no pas els proposats durant el curs.

Per tal de poder-se presentar a l'examen de setembre, els alumnes hauran de entregar durant l'estiu els nous problemes per escrit (només els associats a les pràctiques no entregades) junt amb el programa corresponent. La data límit per aquesta entrega serà el 1 de setembre.

Es faran controls per detectar possibles còpies entre problemes resolts i programes. En cas detectar-se casos evidents de còpia tots els involucrats perdran la convocatòria en curs.

Avaluació

Avaluació continuada	Examen final (1ª convocatòria)	Examen final (2ª convocatòria)
☐ NO	☐ No n'hi ha	X Només per als estudiants que compleixin les condicions següents:

X Sí En què consisteix? Cal entregar problemes resolts per accedir a les pràctiques i cal fer les pràctiques.	X Només per als estudiants que compleixin les condicions següents: Haver entregat un mínim de 4 pràctiques.	Haver entregat un mínim de 4 pràctiques.
	☐ Obligatori per a tothom	☐ Oberta a tothom

La part teòrica i de problemes de l'assignatura s'avaluarà amb un examen de tota la matèria a final del quadrimestre. L'examen però consistirà només en la resolució de problemes sense demanar cap demostració teòrica. Els problemes seran del mateix tipus que s'han fet a les classes de problemes. Entenem que els alumnes d'Enginyeria Informàtica han de saber utilitzar els mètodes i saber d'on provenen però no cal que coneguin les demostracions.

La nota de pràctiques s'obtindrà tal i com es descriu a l'apartat "Pràctiques".

Ambdues notes es donaran entre 0 i 10 i hauran de ser més grans o iguals que 3 per donar opció a aprovar.

La qualificació final s'obtindrà de ponderar al 80% la part teòrica/problemes i al 20% la part pràctica sempre que totes dues siguin iguals o superiors a 3.

Convalidacions: Per aquest curs, i sense que serveixi com a norma general per a propers cursos on cada tutor té la potestat de decidir sobre el tema, es convalidarà la nota de la pràctica o de l'examen escrit a tots aquells alumnes que l'haguessin fet i aprovat en el curs anterior (i només del curs anterior). El càlcul seguirà l'esquema 80-20. De totes maneres, tot alumne té el dret de presentar-se de nou, és a dir de fer un nou examen teòric, o be a fer les pràctiques segons l'esquema indicat a "Pràctiques".

Els alumnes que no aprovin la part pràctica (amb un mínim de 4 pràctiques entregades) poden presentar-se a l'examen escrit de juny, però en cas de aprovar-lo (i no aprovar l'assignatura), els constarà com a no presentat fins que s'entreguin les pràctiques al setembre.

Els alumnes als que al juny els manqui d'entregar alguna pràctica i no hagin encara aprovat, l'hauran d'entregar abans del 1 de setembre. Si un alumne ha obtingut una nota molt baixa de pràctiques, pot tornar a enviar també aquelles pràctiques que pitjor li hagin sortit per tal de millorar aquesta nota.

Els alumnes que hagin suspès l'examen escrit de juny, han de presentar-se a l'examen de setembre independentment de que hagin entregat pràctiques al setembre i que es pugui donar el cas de que aquestes pràctiques siguin suficients per aprovar. En qualsevol cas, si es dones la circumstància de que un alumne obtingués un resultat pitjor a l'examen escrit de setembre que al juny, es valoraria el millor del dos.

Bibliografia bàsica

A. Aubanell, A. Benseny i A. Delshams, Eines bàsiques del Càlcul numèric, Manuals de la UAB, (1992)

C. Bonet i altres, Introducció al Càlcul Numèric, Universitat Politècnica de Catalunya, (1999)

Bibliografia complementària

R. L. Burden y J. D. Faires, Análisis Numérico, Grupo Editorial Iberoamérica, (1985)

A. Bjorck i G. Dahlquist, Numerical methods, PrenticeHall, Englewood Cliffs, New Jersey (1977)

Enllaços web

<http://mat.uab.cat/~artes/mcn/mcn.htm>

Programa en castellano

1. APLICACIONES AL ALGEBRA LINEAL.
 - 1.1 Métodos Gausianos. Descomposición LU.
 - 1.2 Eliminación Gausiana con pivotaje.
 - 1.3 Métodos iterativos: Jacobi y Gauss-Seidel.
 - 1.4 Valores y vectores propios. Métodos de la potencia y de la potencia inversa.
2. RESOLUCION DE ECUACIONES NO LINEALES.
 - 2.1 Método de Newton.
 - 2.2 Métodos de Secante, Muller y Txebyshev.
 - 2.3 Orden de convergencia de un método.
 - 2.4 Teorema de Sturm.
3. APROXIMACION DE FUNCIONES.
 - 3.1 Interpolación polinomial. Métodos de Lagrange, Newton y Hermite.
 - 3.2 El error en la interpolación polinomial.
 - 3.3 Interpolación Spline. Splines cúbicos naturales.
 - 3.4 Aproximación trigonométrica.
 - 3.5 Transformada rápida de Fourier.
4. INTEGRACION NUMERICA.
 - 4.1 Fórmulas de Newton-Côtes. Fórmulas del trapecio y de Simpson.
 - 4.2 Fórmulas compuestas. Método de Romberg.
 - 4.3 Otros métodos de cuadratura.
5. ERRORES.
 - 5.1 Fuentes de error.
 - 5.2 Representación numérica con ordenadores. Representación en coma flotante.
 - 5.3 Truncamiento y redondeo.
 - 5.4 Propagación del error de los datos y los cálculos.
 - 5.5 Problemas mal condicionados.

Program in english

1. APLICATIONS TO LINEAR ALGEBRA.
 - 1.1 Gaussian methods. LU decomposition.
 - 1.2 Gaussian elimination with pivoting.
 - 1.3 Recursive methods: Jacobi and Gauss-Seidel.
 - 1.4 Eigenvalues and Eigenvectors. Power method and Inverse power method.
2. SOLUTION OF NON LINEAR EQUATIONS.
 - 2.1 Newton method.
 - 2.2 Secant, Muller and Txebyshev methods.
 - 2.3 Order of convergence.
 - 2.4 Sturm's Theorem.
3. APROXIMATION OF FUNCTIONS.
 - 3.1 Polynomial interpolation. Lagrange, Newton and Hermite methods.
 - 3.2 The error in the polynomial interpolation.
 - 3.3 Spline interpolation. Cubic natural Splines.
 - 3.4 Trigonometrical aproximation.
 - 3.5 Fast Fourier Transform.
4. NUMERICAL INTEGRATION.
 - 4.1 Newton-Côtes formules. Trapezoidal and Simpson methods.
 - 4.2 Compuound formules. Romberg's method.
 - 4.3 Other integration methods.
5. ERRORS.
 - 5.1 Sources of errors.
 - 5.2 Numerical representation with computers. Representation in floating point.
 - 5.3 Cut and closest aproximation.
 - 5.4 Propagation of data and calculus errors.
 - 5.5 Bad conditioned problems.