

GUIA DOCENT

curs 2007-2008

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 d'equacions diferencials ordinàries, la resolució de sistemes d'equacions o l'aproximació mínim quadràtica.

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.

3. Continguts.

(1) 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.

- (b) PROBLEMES DE VALORS A LA FRONTERA PER EQUACIONS DIFERENCIALS ORDINÀRIES
 - Mètode de tir, simple i paral·lel.
 - Mètodes de diferències finites.

(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.
 - Mètode de Bairstow i Teorema de l'índex.

(3) Aproximació de funcions

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

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, per a la implementació de mètodes numèrics bàsics. També és molt recomanable certs dominis d'Excel o d'algun manipulador algebraic com el Maple per tal de realitzar els càlculs més simples i petites iteracions de forma més eficaz que amb una calculadora i sense tenir la necessitat de recórrer a un llenguatge de més alt nivell.

7. Metodologia.

Aquesta assignatura té 3 hores setmanals de teoria i una de problemes. A més hi haurà quatre sessions de dues hores de pràctiques al llarg del primer quadrimestre i 4 més al llarg del segon quadrimestre. Durant el segon quadrimestre també hi hauran sessions de tutoria per tal d'assessorar a l'alumne en la realització dels programes demanats.

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 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. En la primera sessió que serà comú a tots els alumnes es farà un repàs del llenguatge Maple i s'aprofitarà per posar a prova la precisió numèrica dels ordinadors i els problemes que podem sorgir si es treballa al límit de la precisió. En les altres tres pràctiques del primer semestre es proposaran alguns mètodes dels tractats a classe de teoria i problemes per tal de ser implementats en llenguatge Maple. Aquestes pràctiques han de ser realitzades pels alumnes i entregades al professor per tal de ser avaluades. Les pràctiques han de funcionar perfectament i amb l'objectiu de fomentar el treball al llarg del curs, la seva puntuació estarà en funció del temps que es trigui en entregar-les. Una pràctica entregada abans del divendres de la setmana següent a la que es va proposar tindrà 10 punts. Es restarà un punt per cada setmana que passi d'aquesta data. En cap cas, però, la nota podrà ser inferior a 5. El fet fixar un dijous com a data lí hem permet de corregir el divendres i comunicar a l'alumne si s'accepta la pràctica o no abans del cap de setmana, i això permet a l'alumne de gaudir d'uns dies més per millorar la pràctica.

Per les classes de pràctiques del segon quadrimestre utilitzarem ja un llenguatge d'alt nivell especialment adreçat al càlcul numèric. El llenguatge de programació haurà de ser C. 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.

Hi haurà un examen de pràctiques al final del segon quadrimestre (juny) i una convocatòria al setembre per qui no hagi entregat o aprovat al juny. El dia de l'examen 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.

Val la pena recordar que tot i ser aquesta una assignatura anual, el fet de que la docència de la teoria es faci en el primer semestre, fa natural que el primer examen es faci el mes de febrer, tot i que les notes no siguin definitives fins al juny amb la introducció de les pràctiques. Per tant, per imperatiu legal, la segona convocatòria de l'examen escrit tindrà lloc el mes de setembre.

Per avaluar la part pràctica es pendran les notes dels programes demanats durant els dos quadrimestres ponderant un 30% els del primer quadrimestre i un 70% els del segon.

La nota de pràctiques es donarà entre 0 i 10 i haurà de ser més gran o igual que 5 per aprovar les pràctiques. L'exàmen de pràctiques tindrà lloc a final del segon quadrimestre.

La qualificació final s'obtindrà de ponderar al 70 % la part teòrica i al 30 % la part pràctica sempre que les pràctiques estiguin aprovades. Si no s'han aprovat les pràctiques l'assignatura es considerarà suspesa.

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 anlysis*, 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 i Pràctiques (primer semestre): Joan C. Artés, C1/122, artes@mat.uab.cat
- Problemes: Noemí Ruíz, C1/212, noemirm@mat.uab.cat
- Pràctiques (segon semestre): Josep Maria Mondelo, C1/310, jmm@mat.uab.cat