Guia docent de l'assignatura de Mètodes Numèrics
Llicenciatura de Matemàtiques UAB, 2006–2007

1 Identificació de l'assignatura

Nom: Mètodes numèrics.
Codi: 27993

2 Objectius de l'assignatura

La ciència i la tecnologia es recolzen en models matemàtics de fenòmens reals, desenvolupats amb finalitats predictives. Un mínim de realisme dóna lloc a models intractables de forma analítica, de manera que l'única manera d'estudiar-los és mitjançant el càlcul de solucions aproximades. L'estudi de tècniques (mètodes numèrics) per l'obtenció d'aquestes aproximacions és l'objectiu de l'anàlisi numèrica, de la qual aquesta assignatura n'és una introducció. Els mètodes numèrics precisen d'un esforç de càlcul depenent de la complexitat del model i la precisió desitjada. D'acord amb els standards d'avui en dia, aquest esforç de càlcul fa indispensable l'ús d'ordinadors.

L'objectiu de l'assignatura, apart dels aspectes formatius que comparteix amb les altres assignatures de primer cicle, és preparar els estudiants per resoldre els problemes de tipus numèric que pugin trobar a la seva pràctica professional. Això inclou tant el coneixement precís dels diversos mètodes i la seva idoneïtat en diverses situacions com la destresa en la seva aplicació a la resolució de problemes concrets amb l'ajuda d'un ordinador. És per això que una part important del pes de l'assignatura recau en les sessions pràctiques.

3 Continguts

1.– Errors.

Classificació. Representació de números reals. Aritmètica de punt flotant. Propagació d'errors. Algorismes estables i inestables. Problemes mal condicionats.

2.– Zeros de funcions d'una variable.

Mètodes de la bisecció, de Newton i de la secant. Mètodes de punt fix. Ordre de convergència. Acceleració de la convergència: mètodes d'Aitken i Steffensen. Mètode d'Sturm.

3.– Interpolació polinòmica

Existència i unicitat del polinomi interpolador de Lagrange. Càlcul: polinomis bàsics de Lagrange, algorisme de Neville, diferències dividides de Newton. Interpolació d'Hermite generalitzada. Interpolació per splines.

4.– Diferenciació i integració numèrica

Derivació numèrica. Extrapolació de Richardson. Fórmules d'integració interpolatòria, fórmules tancades de Newton–Côtes, regles compostes. Mètode de Romberg.

5.– Sistemes lineals

Substitució endavant i endarrera per sistemes triangulars. Mètode de Gauss. Estratègies de pivotatge. Factorització LU. Càlcul de determinants i inverses de matrius. Sistemes mal condicionats.

6.– Programació lineal

Exemples clàssics. Tipus de formulacions. Resolució geomètrica. Mètode del símplex (primera i segona fases).

4 Temps d'estudi personal que ha de dedicar un estudiant per superar-la

L'assignatura consta de dos quadrimestres. Durant el primer, les hores presencials es divideixen en dues hores setmanals de teoria, una de problemes i una de pràctiques (que, amb la divisió en dos grups de pràctiques, es converteix en dues hores bisetmanals). Durant el segon quadrimestre, es fan dues hores de teoria durant la meitat del quadrimestre, mentre que les hores de problemes i pràctiques es distribueixen igual que durant el primer quadrimestre. Les hores presencials es completen amb les tres proves durant el curs (t_1, t_2, t_3). La primera prova serà oral i suposarà entre 5 i 10 minuts per a cada alumne. Les altres dues seran de quatre hores cadascuna (màxim).

Respecte de l'estudi personal, s'estima una hora per cada hora de teoria, dues hores per cada hora de problemes i dues hores per cada hora de pràctiques. A aquestes hores s'afegeixen les hores de tutories, que s'estimen en vint minuts per tema de teoria i mitja hora per pràctica (comptant un total de 6 pràctiques). Finalment, la preparació de les proves parcials t_1, t_2, t_3, que permeten superar l'assignatura, s'estima en 4, 8, i 8 hores, respectivament.

El total d'hores de dedicació se sintetitza en el següent requadre. S'han comptat 14 setmanes per quadrimestre.

Presencials		No presencials	
Classes de teoria	42	Estudi de teoria	42
Classes de problemes	28	Resolució de problemes	56
Classes de pràctiques	28	Recerca bibliogràfica	6
Tutories	5	Preparació de pràctiques	56
Proves parcials	8	Preparació de treballs	
Proves finals		Preparació d'exàmens	20
Total presencials	111	Total no presencials	180
TOTAL			291

5 Destreses a adquirir

Destreses transversals:

- Adquirir destresa en la programació per tal d'implementar amb eficiència els mètodes numèrics vistos al llarg del curs.
- Adquirir destresa en el maneig del software bàsic per la simulació numèrica i la representació de resultats.

- Expressar-se amb claredat i rigor en l'enunciat i demostració de teoremes, especificacions algorísmiques, resolució d'exercicis i documentació de pràctiques.

Destreses específiques:

- Fitar els errors de representació en punt flotant, els errors d'arrodoniment i la seva propagació. Reformular expressions per tal de reduir l'amplificació de l'error. Detectar i corregir algorismes numèricament inestables.

- Emprar els mètodes de la bisecció, Newton–Raphson, secant d'iteració simple per trobar zeros de funcions. Determinar intervals de convergència per als mètodes de Newton i iteracions simples. Estimar el nombre iterats necessaris i emprar criteris d'aturada per assegurar una precisió prefixada. Determinar l'ordre de convergència d'una iteració simple. Separar les arrels de polinomis mitjançant successions de Sturm.

- Conèixer els tipus bàsics d'interpolació polinomial en una variable: Lagrange, Taylor, Hermite i Hermite generalitzada. Fitar l'error d'interpolació en cadascun d'ells. Conèixer i aplicar els mètodes bàsics d'interpolació polinomial: polinomis bàsics de Lagrange, Neville, diferències dividides de Newton generalitzades. Calcular splines cúbics.

- Deduir fórmules de derivació numèrica i el corresponent error. Conèixer i aplicar les més habituals. Trobar el pas òptim de derivació numèrica per tal de minimitzar l'error total (truncament + arrodoniment). Conèixer el procediment d'extrapolació repetida de Richardson. Aplicar-lo a la derivació numèrica. Deduir les fórmules d'integració interpolatòria i les corresponents regles compostes. Aplicar-les i fitar l'error corresponent. Conèixer i aplicar el mètode de Romberg.

- Conèixer el mètode de Gauss i les estratègies de pivotatge associades. Establir l'equivalència amb la descomposició LU, i entre estratègies de pivotatge i matrius de permutació. Aplicar la metodologia anterior al càlcul de determinants i inverses de matrius. Entendre el concepte de sistema lineal mal condicionat.

- Interpretar problemes d'optimització de la vida real com a problemes de programació lineal. Reduir problemes de programació lineal generals a forma standard restringida. Resoldre geomètricament problemes bidimensionals. Conèixer i aplicar el mètode del símplex en les seves dues fases.

6 Requisits previs

Com a coneixements previs, es pressuposen: els resultats fonamentals de continuïtat, derivabilitat i integrabilitat de funcions reals d'una variable, fonaments d'àlgebra lineal i càlcul matricial, nocions bàsiques sobre algorismes i el llenguatge de programació C. Aquests coneixements són contingut de les assignatures *Introducció a l'àlgebra lineal*, *Càlcul infinitesimal* i *Informàtica*, de primer curs.

7 Metodologia de l'ensenyament

Aquesta assignatura té dues hores setmanals de teoria, una hora setmanal de problemes i dues hores bisetmanals de pràctiques, alternant grups.

A les classes teòriques, s'introduiran els diversos mètodes i se n'estudiaran les propietats, amb especial èmfasi en la fitació d'errors. La comprensió d'aquests aspectes dóna la base per a poder resoldre problemes i dur a terme les pràctiques.

Les classes de problemes consistiran principalment en la resolució de problemes a la pissarra per part del professor. No obstant, es requerirà també la participació dels alumnes a classe, que es tindrà en compte a l'avaluació.

Es proposaran diverses pràctiques durant el curs. Cada pràctica contindrà un guió, d'acord amb el qual s'haurà d'entregar un informe, que serà la base per la puntuació de la pràctica, juntament amb el codi en C elaborat. Oportunament s'anirà anunciant el termini d'entrega de cada pràctica.

Les sessions pràctiques tindran lloc a una aula d'informàtica de la facultat, i es dedicaran a la resolució de dubtes relacionats amb la realització de cada pràctica. No s'espera que els alumnes acabin les pràctiques durant les sessions pràctiques, sinó que hi hauran de dedicar temps d'estudi personal.

8 Avaluació

La qualificació final s'obtindrà de ponderar al 75% la part teòrica i al 25% la part pràctica. La part teòrica es pot aprovar o bé per parcials, o bé per l'examen final de juliol (1a convocatòria) o bé per l'examen final de setembre (2a convocatòria).

Les pràctiques s'hauran de lliurar al llarg del curs, amb terminis que s'anunciaran oportunament. Cada dia de retard en el lliurament d'una pràctica es penalitzarà multiplicant la nota per 0.75. La nota final de pràctiques serà el promig de les notes de cada pràctica. Remarquem que **no hi haurà examen de recuperació de pràctiques**, i **és requisit indispensable per superar l'assignatura** que la qualificació de pràctiques sigui igual o superior a 4.

La part teòrica s'avaluarà al llarg del curs mitjançant tres proves, la primera oral i les altres dues consistents en resoldre problemes i alguna pregunta teòrica. La primera (t_1) es farà a meitat del primer quadrimestre, la segona (t_2) al final del primer quadrimestre i la tercera (t_3) al final del segon quadrimestre. La prova t_2 eliminarà matèria, de manera que per la prova t_3 només entrarà la matèria del segon quadrimestre.

El 10% el de la nota de la part teòrica de curs procedirà de l'entrega d'un problema resolt per cada tema i l'exposició d'algun dels problemes entregats a les sessions de problemes. Anomenem p_b aquesta qualificació.

La qualificació de curs de la part teòrica s'obté mitjançant la fórmula

$$t_c := 0.1p_b + 0.9(0.20t_1 + 0.40t_2 + 0.40t_3),$$

i la qualificació de curs global mitjançant

$$q_c := 0.75t_c + 0.25p_r.$$

Els alumnes que obtinguin $t_1 \geq 2.5$, $t_2 \geq 3.5$, $t_3 \geq 3.5$, $t_c \geq 4$, $p_r \geq 4$ i $q_c \geq 5$ hauran superat l'assignatura en primera convocatòria.

Per als alumnes que no aprovin per qualificació de curs, hi haurà l'examen de recuperació de juliol per la part teòrica, que també es pot emprar per pujar la qualificació de curs. Diguem t_j la nota de la recuperació de juliol. Llavors la qualificació de juliol serà

$$q_j := 0.75t_j + 0.25p_r.$$

Els alumnes que obtinguin $t_j \geq 4$, $p_r \geq 4$ i $q_j \geq 5$, hauran superat l'assignatura en primera convocatòria.

Per als alumnes que no aprovin el juny–juliol, hi haurà l'examen de recuperació de setembre per la part teòrica, diguem t_s la seva qualificació. Llavors la qualificació de setembre serà

$$q_s := 0.75t_s + 0.25p_r.$$

Els alumnes que obtinguin $t_s \geq 4$, $p_r \geq 4$ i $q_s \geq 5$, hauran superat l'assignatura en segona convocatòria.

Obtenir $p_r < 4$ suposa un "no presentat" en primera i segona convocatòria. No aprovar amb la qualificació de curs i no presentar-se a la recuperació de juliol suposa un "no presentat" en primera convocatòria.

9 Bibliografia

La referència bàsica del curs són els apunts de l'assignatura, que podreu trobar al campus virtual. Les següents referències són d'un nivell semblant al del curs:

- A. Aubanell,A. Benseny,A. Delshams: *Eines bàsiques de càlcul numèric*, Manuals de la UAB 7, Publ. UAB, 1991.
- M. Grau, M. Noguera: *Càlcul numèric*, Edicions UPC, 1993.
- J.D. Faires, R. Burden: *Métodos Numéricos*, 3a. ed, Thomson, 2004.
- R. Burden, J.D. Faires: *Numerical analysis*, 6a ed., Brooks/Cole, 1997. En castellà: *Análisis numérico*, 6a ed., International Thomson, 1998.
-

A continuació s'inclou bibliografia més avançada, que pot ser útil per consultes puntuals.

- D. Kincaid, W. Cheney: *Numerical analysis*, 2a ed., Brooks/Cole, 1996. En castellà: *Análisis numérico*, Addison–Wesley Iberoamericana, 1994.
- P. Henrici: *Elements of numerical analysis*, Wiley, 1964. En castellà: *Elementos de análisis numérico*, Trillas, 1968.
- G. Dahlquist, Å Björk: *Numerical methods*, Prentice Hall, 1964.
- E. Isaacson, H.B. Keller: *Analysis of numerical methods*, Wiley, 1966.
- J. Stoer, R. Bulirsch: *Introduction to numerical analysis*, 2a ed., Springer, 1993.

Trobareu que moltes demostracions de teoria són adaptades d'aquestes referències, especialment de Stoer & Bulirsch i Isaacson & Keller. Finalment, les dues referències següents són per la part de programació. La primera és el manual de referència del llenguatge C. La segona és un manual d'estil.

- B. Kernighan and D.M. Ritchie: *The C programming language*, 2a ed., Prentice–Hall 1998. En castellà: *El lenguaje de programación C*, Prentice–Hall Hispanoamericana, 1991.

- B.W. Kernighan, R. Pike: *The practice of programming*, Addison–Wesley 1999. En castellà: *La práctica de la programación*, Perason Educación, 2000.

10 Professorat

Anna Samà (pràctiques), despatx C1/-162, `sama@mat.uab.es`
Josep Maria Mondelo (teoria i pràctiques), despatx C1/310, `jmm@mat.uab.es`
Noemí Ruiz (problemes), despatx C1/212, `noemirm@mat.uab.es`