

Mètodes numèrics i aplicacions informàtiques

Codi: 100966

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500253 Biotecnologia	FB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: Susana Serna Salichs

Correu electrònic: Susana.Serna@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: No

Grup íntegre en espanyol: Sí

Prerequisits

És fortament recomanable haver superat les assignatures següents: Matemàtiques i els continguts d'Informàtica de l'assignatura Laboratori Integrat 1.

Entenem que els estudiants ja coneixen l'us de calculadores i d'ordinadors.

Objectius

A l'assignatura de Mètodes Numèrics s'estudiaran algorismes computacionals 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 i la resolució numèrica d'equacions diferencials.

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.

Capacitats o destreses a adquirir.

- 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.

Competències

- Aplicar els recursos informàtics per a la comunicació, la recerca d'informació, el tractament de dades i el càlcul.
- Prendre decisions.
- Raonar de forma crítica.
- Utilitzar els fonaments de matemàtiques, física i química necessaris per a comprendre, desenvolupar i avaluar un procés biotecnològic.

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar els diferents tipus d'errors i la seva importància en l'obtenció de la solució de problemes. Aplicar alguns mètodes numèrics de resolució d'equacions i d'integració.
2. Aplicar els recursos informàtics per a la comunicació, la recerca d'informació, el tractament de dades i el càlcul.
3. Interpretar les gràfiques de funcions d'una i diverses variables, i relacionar-les amb les seves fórmules.
4. Prendre decisions.
5. Raonar de forma crítica.

Continguts

0. REPÀS DE CONEIXEMENTS BÀSICS PER L'ASSIGNATURA

Derivació i integració en varies variables. Gràfiques de funcions.

Fòrmules de Taylor en una i varies variables.

1. ERRORS

Fonts d'error.

Error absolut i error relatiu.

Propagació dels errors en les dades i en els càlculs.

Problemes mal condicionats.

2. RESOLUCIÓ D'EQUACIONS NO LINEALS

Mètode de Bisecció, punt fix, secant i Newton.

Ordre de convergència.

Sistemes d'equacions no lineals.

3. INTERPOLACIÓ I INTEGRACIÓ DE FUNCIONS

Fórmula de Lagrange i de diferències dividides.

L'error en la interpolació polinomial.

Fórmula del trapezi.

Fórmula de Simpson.

L'error en la integració.

Fórmules compostes.

4. EQUACIONS DIFERENCIALS

Introducció.

Mètode d'Euler.

Mètode de Taylor.

Mètodes de Runge-Kutta.

Tècniques d'adaptació del pas.

Sistemes d'equacions diferencials.

5. REGRESSIÓ I APROXIMACIÓ

Sistemes sobredeterminats

Aproximació per mínims quadràtics.

Aproximació de funcions dependents de dos paràmetres.

Consultar l'espai docent de la Coordinació de Grau i el de l'assignatura.

Metodologia

Aquesta assignatura curs consta de tres hores per setmana que es reparteixen en seminaris teòrics i sessions de problemes.

A més, dins de l'assignatura de Laboratori integrat 4 hi ha cinc sessions de tres hores de pràctiques al llarg del quadrimestre relacionades amb la matèria que aquí s'imparteixi.

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.

Les classes de problemes s'intercalaran dins de l'horari habitual a mesura que es vagin completant els temes. Podreu trobar els fulls de problemes a la pàgina web del campus virtual.

A les sessions de pràctiques l'alumne haurà de resoldre determinats problemes numèrics amb l'ajut de l'ordinador. Aquestes sessions tindran lloc als sales de PC's 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 les pràctiques es proposaran alguns mètodes dels tractats a classe de teoria i problemes per tal de ser implementats.

Es recomana fortament l'assistència a les classes de problemes. Les condicions d'assistència a les classes de pràctiques vindran regulades per l'assignatura de Laboratori Integrat 4. Tot i això, també es recomana

fortament assistir a les sessions de Laboratori Integrat 4 relacionades amb aquesta assignatura doncs la realització simultàniade les classes teòriques, de problemes i pràctiques és la millor forma d'assolir els coneixements aquí impartits.

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

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de teoria i problemes	45	1,8	1, 2, 3, 4, 5
Tipus: Supervisades			
Avaluació continuada	5	0,2	1, 2, 3, 4, 5
Tipus: Autònomes			
Treball personal, estudi i resolució de problemes	95	3,8	1, 2, 3, 4, 5

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme mitjançant una avaluació continuada en què l'alumne ha de demostrar el seu grau d'assoliment dels conceptes de l'assignatura a través de lliuraments de problemes i proves escrites de teoria i de resolució de problemes.

Al llarg del curs hi haurà quatre blocs de avaluació. Cada un d'ells estarà format per dues proves diferents: una basada en preguntes de teoria i una altra en la resolució de problemes.

Hi haurà quatre entregues de problemes que s'aniran anunciant segons avanci el temari i per a les que l'alumne tindrà una setmana per realitzar cadascuna d'elles.

Amb el resultat de totes les proves s'obtindrà una qualificació que de ser igual o superior a 5 donarà la qualificació final del curs. No cal obtenir cap nota mínima per cap de les proves parcials per aprovar l'assignatura.

Les matricules d'honor seran assignades a les millors notes obtingudes en l'avaluació continuada.

Hi haurà un examen de recuperació a final de curs en la qual l'estudiant pot recuperar els blocs no superats si la mitjana total obtinguda en l'assignatura és com a mínim de 3.

Per participar en la recuperació l'alumne ha d'haver estat avaluat prèviament en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues tercers parts de la qualificació total de l'assignatura. Per tant, l'alumne obtindrà la qualificació de "No Avaluable" quan les activitats d'avaluació realitzades tinguin una ponderació inferior al 67% de la qualificació final.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Lliurament de problemes	4%	1	0,04	1, 2, 3, 4, 5
Prova parcial teoria 1	5%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5

Prova parcial teoria 2	5%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5
Prova parcial teoria 3	5%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5
Prova parcial teoria 4	5%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5
Prova resolució de problemes 1	19%	0,75	0,03	1, 2, 3, 4, 5
Prova resolució de problemes 2	19%	0,75	0,03	1, 2, 3, 4, 5
Prova resolució de problemes 3	19%	0,75	0,03	1, 2, 3, 4, 5
Prova resolució de problemes 4	19%	0,75	0,03	1, 2, 3, 4, 5

Bibliografia

- A. Bjorck i G. Dahlquist, Numerical methods, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1977)
- 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, (1989)
- R. L. Burden y J. D. Faires, Análisis Numérico, Grupo Editorial Iberoamérica, (1985)