

Mètodes Numèrics i Probabilístics

Codi: 104395
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2503740 Matemàtica Computacional i Analítica de Dades	OB	2	2

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

Professor/a de contacte

Nom: Joan Carles Artés Ferragud
Correu electrònic: JoanCarles.Artes@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)
Grup íntegre en anglès: No
Grup íntegre en català: Sí
Grup íntegre en espanyol: No

Altres indicacions sobre les llengües

El meu e-mail habitual es artes@mat.uab.cat

Equip docent

Salvador Borrós Cullell

Prerequisits

Es recomanable haver fet al menys un curs d'anàlisi, un d'àlgebra lineal i un de càlcul numèric.

Objectius

En els cursos d'anàlisi ens han ensenyat a calcular àrees de funcions per mitjà d'integrals, però també que no totes les funcions tenen una integral que es pugui expressar en una quantitat finita de funcions elementals.

En els cursos d'àlgebra ens han ensenyat que un polinomi de grau n té n arrels (reals o complexes), però també que no tots els polinomis de grau 5 o superior tenen necessàriament que poder-se resoldre per mitjà de radicals. I també que moltes altres equacions no polinomials no es poden resoldre de forma explícita.

En els cursos d'àlgebra ens han ensenyat a resoldre sistemes d'equacions mitjançant el mètode de Cramer, però sabeu que per resoldre un sistema 20×20 d'aquesta manera es necessitaria més temps del que té l'univers?

En el primer curs de càlcul numèric ja es van introduir mètodes per resoldre aquest tipus de problemes, no per mètodes exactes, sinó per aproximacions numèriques. Aquesta forma d'abordar els problemes presenta algunes avantatges i alguns inconvenients.

Les avantatges principals són que d'aquesta manera es poden resoldre problemes que d'altra manera seria impossible de resoldre. Una desavantatge és que no es troba mai la solució exacte sinó una aproximació numèrica. Això queda compensant per l'avantatge de que podem decidir a priori el grau de precisió amb la que

volem obtenir la solució i aquest pot ser tan gran com desitgem (i disposem d'un ordinador prou bo com per fer-ho amb un temps raonable). Un altra desavantatge és que el càlcul numèric es troba permanentment lluitant contra tota mena d'errors en les dades inicials, en la introducció de dades, i en el arrodoniment de les operacions, i aquests errors a més es propaguen a mesura que fem més i més operacions amb dades ja corruptes. Per tant, els mètodes de càlcul numèric han de saber lidiar també amb aquest problema.

El primer curs de càlcul numèric es va acabar amb la resolució d'integrals de forma numèrica. En aquest segon curs ho seguirem fent amb nous mètodes més potents.

Un altra forma de calcular integrals, per més inversemblant que sembli, és mitjançant mètodes aleatoris. Aquests mètodes s'han anomenat tradicionalment mètodes de Montecarlo com a paradigma de la meca del joc d'atzar. Veurem com de manera molt simple (encara que llarga de càlcul) es poden calcular àrees de funcions en una o varies dimensions, que d'altra manera serien impossibles de calcular.

En aquest curs presentarem un nou tipus de problemes matemàtics que son molt freqüents en les modelitzacions de problemes de la vida real. De fet, pocs problemes de la vida real acaben simplement necessitant del càlcul d'una integral o de la solució d'una equació polinomial. La majoria dels problemes que es plantegen a la vida real acaben en problemes d'equacions diferencials, ja siguin ordinàries o be parcials. En un problema d'equacions diferencials, l'objectiu no es trobar un número que resolgui un problema, sinó trobar una funció.

Alguns problemes d'equacions diferencials ordinàries poden ser resolts de forma exacte i això s'ha fet en l'assignatura de segon semestre que es diu Equacions Diferencials Ordinàries. Però com que moltes equacions diferencials tampc son resolubles de forma algebraica o analítica amb un nombre finit de termes, cal també usar d'eines numèriques per resoldre-les.

Competències

- Aplicar coneixements bàsics sobre l'estructura, l'ús i la programació d'ordinadors, sistemes operatius i programes informàtics per solucionar problemes de diferents àmbits.
- Avaluar de manera crítica i amb criteris qualitat el treball realitzat.
- Calcular i reproduir determinades rutines i processos matemàtics amb agilitat.
- Dissenyar, desenvolupar i avaluar solucions algorísmiques eficients per a problemes computacionals d'acord amb els requisits establerts.
- Formular hipòtesis i imaginar estratègies per confirmar-les o refutar-les.
- Que els estudiants hagin demostrat que comprenen i tenen coneixements en una àrea d'estudi que parteix de la base de l'educació secundària general, i se sol trobar a un nivell que, si bé es basa en llibres de text avançats, inclou també alguns aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda d'aquell camp d'estudi.
- Que els estudiants hagin desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements propis a la seva feina o vocació d'una manera professional i tinguin les competències que se solen demostrar per mitjà de l'elaboració i la defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seva àrea d'estudi.
- Relacionar objectes matemàtics nous amb altres de coneguts i deduir-ne les propietats.
- Utilitzar aplicacions informàtiques en àlgebra, estadística, càlcul numèric i simbòlic, visualització gràfica, optimització o altres per experimentar i resoldre problemes.
- Utilitzar eficaçment la bibliografia i els recursos electrònics per obtenir informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Avaluar de manera crítica i amb criteris de qualitat el treball desenvolupat.
2. Avaluar els avantatges i els inconvenients de l'ús del càlcul i de l'abstracció.
3. Avaluar i analitzar la complexitat computacional de les solucions algorísmiques per poder desenvolupar i implementar aquella que garanteixi el millor rendiment.

4. Comprendre els principis bàsics de la lògica dels computadors.
5. Contrastar, si és possible, l'ús del càlcul amb l'ús de l'abstracció per resoldre un problema.
6. Controlar els errors que produeixen les màquines en calcular.
7. Conèixer el funcionament intern de les computadores i ser crítics amb els resultats que ens donen.
8. Conèixer els conceptes bàsics de l'estructura i la programació dels computadors.
9. Descriure el funcionament bàsic dels sistemes de còmput.
10. Descriure els conceptes i els objectes matemàtics propis de l'assignatura.
11. Desenvolupar estratègies autònomes per a la resolució de problemes propis del curs, discriminar els problemes rutinaris dels no-rutinaris i dissenyar i avaluar una estratègia per resoldre un problema.
12. Identificar les idees essencials de les demostracions d'alguns teoremes bàsics i saber-les adaptar per obtenir altres resultats.
13. Manejar programari científic específic per a l'aplicació d'algoritmes numèrics o la realització automàtica de càlculs simbòlics encaminats a la resolució de problemes concrets.
14. Programar algoritmes de càlcul matemàtic.
15. Que els estudiants hagin demostrat que comprenen i tenen coneixements en una àrea d'estudi que parteix de la base de l'educació secundària general, i se sol trobar a un nivell que, si bé es basa en llibres de text avançats, inclou també alguns aspectes que impliquen coneixements procedents de l'avantguarda d'aquell camp d'estudi.
16. Que els estudiants hagin desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
17. Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
18. Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements propis a la seva feina o vocació d'una manera professional i tinguin les competències que se solen demostrar per mitjà de l'elaboració i la defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seva àrea d'estudi.
19. Reconèixer i identificar els mètodes, els sistemes i les tecnologies propis de la computació.
20. Seleccionar i utilitzar les estructures algorítmiques i de representació de les dades apropiades per a la resolució d'un problema.
21. Utilitzar eficaçment la bibliografia i els recursos electrònics per obtenir informació.
22. Utilitzar els sistemes operatius i els programes d'ús comú en diversos camps.
23. Verificar i assegurar el funcionament correcte d'una solució algorítmica d'acord amb els requisits del problema que cal resoldre.

Continguts

- 1.- Integració numèrica. Mètodes de Newton-Côtes i gaussians
- 2.- Mètodes de Montecarlo per a càlcul d'àrees
 - 2.1- Generació de variables aleatòries
- 3.- Integració numèrica d'equacions diferencials ordinàries (una variable)
 - 3.1- Problema de valors inicials
 - 3.1.1- Mètode d'Euler
 - 3.1.2- Ordre de consistència i de convergència
 - 3.1.3- Mètodes de Taylor
 - 3.1.4- Mètodes múltiples
 - 3.1.5- Mètodes de Runge-Kutta
 - 3.1.6- Mètodes de pas variable
 - 3.2- Problema de valors a la frontera
 - 3.2.1- Mètode de tir
 - 3.2.2- Mètode de diferències dividides

Metodologia

Les eines de les matemàtiques, i molt particularment les del càlcul numèric necessiten ser apreses i practicades. Per molt memoritzada que tinguem una fórmula o un teorema, si no l'hem aplicat cap vegada, es molt possible que no surti bé a la primera. A més, les eines de càlcul numèric s'han fet per resoldre problemes que necessiten una gran quantitat de càlculs i aquest càlculs els farà normalment un ordinador, amb un programa que haurem fet nosaltres. Encara que el programa sigui fet per un altra persona, convé conèixer

com funciona per tal de detectar si algun resultat pot ser inestable o incorrecte.

Però no podem fer un programa per aplicar un mètode si abans no l'hem practicat a mà, ni que sigui amb un problema simple o fins i tot trivial pel qual ni tan sols hagués calgut del mètode numèric.

Les sessions teòriques estaran dedicades a l'exposició per part del professor dels diversos mètodes i la seva anàlisi. L'exposició dels mètodes anirà acompanyada d'exemples del seu comportament, duts a terme amb ordinador, que estaran orientats tant a facilitar la comprensió del mètode com a motivar la seva anàlisi.

A les sessions de problemes es resoldran problemes de tipus teòric i de càlcul. En el cas de problemes de càlcul, n'hi haurà que requeriran l'ús de calculadora i n'hi haurà que requeriran l'ús d'ordinador. En aquest darrer cas els problemes no seran computacionalment intensius, de manera que els algorismes necessaris es podran implementar ràpidament en un llenguatge numèric interpretat o fins i tot en un full de càlcul. Es combinarà la resolució de problemes per part del professor per a tota la classe, per part d'un estudiant per tota la classe i per tots els estudiants alhora, de manera personalo en grup, amb l'ajut del professor.

Les sessions de pràctiques d'ordinador constitueixen la part de l'assignatura dedicada a introduir la computació científica. Estaran dedicades a la solució de problemes computacionalment més intensius, que s'implementaran en un llenguatge compilat. En la solució d'aquests problemes els estudiants construiran progressivament la seva biblioteca personal de rutines que implementen mètodes numèrics bàsics.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	8	0,32	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Classes de pràctiques	15	0,6	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Classes de teoria	30	1,2	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23
Tipus: Autònomes			
Estudi, resolució de problemes i realització de programes	92	3,68	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23

Avaluació

L'avaluació del curs es durà a terme a partir de tres activitats:

Examen parcial (EP): examen de part de l'assignatura, amb preguntes teòriques i problemes. Examen final (EF): examen de tota l'assignatura, amb preguntes teòriques i problemes. Pràctiques d'ordinador (PR): lliurament de codi i un informe.

A més, els estudiants es podran presentar a un examen de recuperació (ER) amb les mateixes característiques que l'examen (EF). Les pràctiques no seran recuperables.

És requisit per a superar l'assignatura que $\max(0.35*EP+0.65*EF, EF, ER) \geq 3.5$ i que $PR \geq 3.5$.

La nota final de l'assignatura serà

$$0.6 * \max(0.35 * EP + 0.65 * EF, EF, ER) + 0.4 * PR$$

Les matrícules d'honor s'atorgaran a la primera avaluació completa de l'assignatura. No seran retirades en cas que un altre estudiant obtingui una qualificació més gran després de considerar l'examen (ER).

Un alumne que no s'hagi presentat a cap examen escrit constarà com a "No avaluable"

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen Parcial	0.21	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 23
Examen final	0.39	3	0,12	1, 2, 3, 5, 6, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 23
Programa Ordinador	0.4	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23

Bibliografia

Bibliografia bàsica:

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.

G. Dahlquist, A. Björk. Numerical methods. Prentice Hall, 1964.

R. Burden, J.D. Faires. Numerical analysis, 6a ed. Brooks/Cole, 1997. En castellà: Análisis numérico, 6a ed., International Thomson, 1998.

G. Hämmerlin, K.-H. Hoffmann. Numerical mathematics. Springer, 1991.

Bibliografia avançada:

E. Isaacson, H.B. Keller. Analysis of numerical methods. Wiley, 1966.

J. Stoer, R. Bulirsch. Introduction to numerical analysis, 3a ed. Springer, 2002.

A. Ralston and P. Rabinowitz. A first course in numerical analysis. McGraw-Hill, 1988.

A. Quarteroni, R. Sacco and F. Saleri. Numerical Mathematics. Springer, 2000.

Programari

C