



Guia docent

200153 - CN - Càlcul Numèric

Última modificació: 07/06/2023

Unitat responsable: Facultat de Matemàtiques i Estadística
Unitat que imparteix: 749 - MAT - Departament de Matemàtiques.
748 - FIS - Departament de Física.

Titulació: GRAU EN MATEMÀTIQUES (Pla 2009). (Assignatura obligatòria).

Curs: 2023 **Crèdits ECTS:** 7.5 **Idiomes:** Català

PROFESSORAT

Professorat responsable: SONIA FERNANDEZ MENDEZ

Altres: Primer quadrimestre:
SONIA FERNANDEZ MENDEZ - M-A, M-B
ABEL GARGALLO PEIRO - M-A, M-B
SERGI PÉREZ ESCUDERO - M-A, M-B
ESTHER SALA LARDIES - M-A, M-B

CAPACITATS PRÈVIES

Àlgebra lineal numèrica
Càlcul diferencial i integral

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:

- CE-2. Resoldre problemes de Matemàtiques, mitjançant habilitats de càlcul bàsic i d'altres, tot planificant-ne la resolució en funció de les eines de què es disposi i de les restriccions de temps i recursos.
- CE-3. Utilitzar aplicacions informàtiques d'anàlisi estadístic, càlcul numèric i simbòlic, visualització gràfica, optimització o d'altres, per a experimentar en Matemàtiques i resoldre problemes.
- CE-4. Desenvolupar programes informàtics que resolguin problemes matemàtics, tot fent servir per a cada cas l'entorn computacional escaient.

Genèriques:

- CB-1. Demostrar posseir i comprendre coneixements de l'àrea de les Matemàtiques, construïts a partir de la base de l'educació secundària general i a un nivell que, tot recolzant-se en llibres de text avançats, inclogui també alguns aspectes que impliquin coneixements provinents de l'avantguarda de l'estudi de les Matemàtiques i de les seves aplicacions a la ciència i a la tecnologia.
- CB-2. Saber aplicar d'una forma professional els coneixements matemàtics al seu treball i posseir les capacitats que, a l'àrea de les Matemàtiques i en les seves aplicacions a la ciència i a la tecnologia, s'acostumen a demostrar mitjançant l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes.
- CB-3. Tenir la capacitat de reunir i interpretar dades rellevants, a l'àrea de les Matemàtiques i en les seves aplicacions, per a emetre judicis que incloguin una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- CG-1. Comprendre i emprar el llenguatge matemàtic. Adquirir la capacitat d'enunciar propietats en diversos camps de la Matemàtica, de construir argumentacions, d'elaborar càlculs i de transmetre els coneixements matemàtics adquirits.
- CG-2. Conèixer demostracions rigoroses d'alguns teoremes clàssics en diferents àrees de la Matemàtica.
- CG-3. Assimilar la definició d'un nou objecte matemàtic en termes d'altres ja coneguts i ser capaç de fer servir aquest objecte en contextos diferents.
- CG-4. Saber abstraure les propietats estructurals (dels objectes matemàtics, de la realitat observada i d'altres àmbits), distingint-les de les que només són ocasionals. Poder comprovar-les amb demostracions o refutar-les mitjançant contraexemples, així com identificar errors en els raonaments incorrectes.
- CG-6. Detectar deficiències en el propi coneixement i superar-les mitjançant la reflexió crítica i l'elecció de la millor actuació per a ampliar aquest coneixement.

Transversals:

4. APRENTATGE AUTÒNOM: Detectar mancances en el propi coneixement i superar-les mitjançant la reflexió crítica i l'elecció de la millor actuació per ampliar aquest coneixement.

METODOLOGIES DOCENTS

Les 5 hores de classe setmanals es divideixen en 3 hores a aula convencional i 2 hores a aula d'ordinadors. Generalment, els conceptes teòrics es presenten i desenvolupen a l'aula convencional. A l'aula d'ordinadors es fan majoritàriament exemples d'implementació i ús dels mètodes numèrics, i exemples d'aplicació en ciències i enginyeria. També es realitza el seguiment de l'evolució dels exercicis pràctics proposats.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

L'assignatura té dos objectius principals: (1) donar una idea global del paper dels mètodes numèrics en la resolució de problemes habituals a les matemàtiques, la física i l'enginyeria, (2) proporcionar una sòlida base en la resolució numèrica dels problemes de càlcul numèric, complementat la formació rebuda a l'assignatura Àlgebra Lineal Numèrica.

L'alumne ha d'adquirir capacitats per:

- Conèixer i entendre les possibilitats, i les limitacions, dels mètodes numèrics per a la resolució de problemes de la matemàtica, la física i l'enginyeria.
- Entendre la necessitat d'assegurar la qualitat del resultat d'interès, i ser capaç de controlar l'error en la solució numèrica.
- Conèixer i entendre les tècniques numèriques bàsiques per a resolució de sistemes d'equacions lineals, càlcul zeros de funcions i resolució de sistemes no lineals, així com les tècniques més habituals d'aproximació de funcions, integració numèrica.
- Conèixer de forma i entendre conceptes bàsics de la resolució numèrica d'EDOs i EDPs.
- Seleccionar i utilitzar un mètode numèric apropiat per a la resolució d'un problema concret, identificant-ne els avantatges i inconvenients.
- Codificar mètodes numèrics de forma eficient en un llenguatge de programació (Python o Matlab, depenent de què s'ha emprat a ALN)
- Analitzar críticament els resultats obtinguts (precisió en el resultat d'interès, adequació del mètode numèric i del model matemàtic, interpretació dels resultats).
- Presentar els resultats de forma clara i concisa.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup petit	30,0	16.00
Hores grup gran	45,0	24.00
Hores aprenentatge autònom	112,5	60.00

Dedicació total: 187.5 h

CONTINGUTS

Zeros de funcions

Descripció:

Plantejament general d'un esquema iteratiu. Mètodes de la bisecció, de la secant i de Newton. Consistència i convergència (ordre i velocitat). Anàlisi de la convergència dels mètodes d'iteració funcional, aplicació a l'anàlisi del mètode de Newton. Mètodes híbrids.

Dedicació: 10h

Grup gran/Teoria: 6h

Grup mitjà/Pràctiques: 4h



Sistemes d'equacions no lineals

Descripció:

Problemes no lineals en física i enginyeria.

Mètode de Newton. Convergència del mètode de Newton. Derivació numèrica per a l'aproximació de la matriu jacobiana.

Introducció als mètodes quasi-Newton. Mètode de Broyden.

Dedicació: 10h

Grup gran/Teoria: 6h

Grup mitjà/Pràctiques: 4h

Aproximació funcional

Descripció:

Plantejament general: motivació, tipus i criteris d'aproximació.

Interpolació polinòmica: teorema fonamental de l'àlgebra, existència i unicitat de solució. Interpolació de Lagrange. Residu de Lagrange. Fenòmen de Runge.

Interpolació seccional (splines): caracterització com a espai vectorial, splines lineals C0, cúbics C1, cúbics C2 i naturals.

Propietats de convergència i adaptativitat.

Aproximació per mínims quadrats: plantejament general i equacions normals per a espais vectorials, propietat d'ortogonalitat.

Malcondicionament de les equacions normals.

Famílies de polinomis ortogonals: plantejament i propietats.

Dedicació: 20h

Grup gran/Teoria: 12h

Grup mitjà/Pràctiques: 8h

Integració numèrica

Descripció:

Plantejament general. Quadratures de Newton-Cotes: deducció del mètode del trapezi i del mètode de Simpson. Fórmula de l'error per a punts equiespaiats. Quadratures de Gauss: deducció de les quadratures, famílies més populars.

Fórmules compostes. Convergència. Quadratures adaptatives. Integració múltiple.

Dedicació: 15h

Grup gran/Teoria: 9h

Grup mitjà/Pràctiques: 6h



Introducció als mètodes numèrics per a equacions diferencials

Descripció:

Part I. Introducció als mètodes numèrics per EDOs:

Problemes de valor inicial. Mètodes basats en aproximacions de les derivades (Euler, Euler enrere, d'altres). Convergència i estabilitat. Anàlisi de la estabilitat absoluta i regions d'estabilitat. Introducció als mètodes de Runge-Kutta: mètode de Heun i forma general dels mètodes de Runge-Kutta. Problemes de contorn. Introducció i aplicacions. Mètode del tret.

Part II. Mètode de les Diferències Finites (DF) per EDPs:

Presentació i interpretació de l'equació parabòlica 1D i condicions de contorn. Aproximació per DF de la derivada segona, sistema d'EDOs resultant de la discretització en espai, valors propis de la matriu del sistema i aplicabilitat dels mètodes per EDOs vistos segons regió d'estabilitat. Solució amb DF de l'equació parabòlica 1D amb el mètode d'Euler i Euler enrere. Condicions d'estabilitat.

Solució per DF de l'equació de convecció, valors propis de la matriu i estabilitat.

Presentació divulgativa de mètodes per EDPs en 2D i 3D i dels conceptes de verificació i validació.

Solució de l'equació de difusió en una esfera assumint simetria esfèrica: aproximació de la derivada segona amb coeficients no constants, plantejament del sistema d'EDOs resultant, aplicació a la modelització numèrica d'una partícula de carbó actiu.

Dedicació: 20h

Grup gran/Teoria: 12h

Grup mitjà/Pràctiques: 8h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

L'assignatura s'avalua mitjançant exàmens (E) i exercicis proposats a classe (A), amb una mitjana ponderada $NF = 0.9E + 0.1A$.

A la convocatòria ordinària la nota d'exàmens es calcula com

$$E = \max(0.4 EP + 0.6 EF, 0.2 EP + 0.8 EF)$$

on EP i EF son la nota de l'examen parcial i final, respectivament. A la convocatòria extraordinària E és el mínim entre 7 i la nota de l'examen extraordinari.

L'entrega dels exercicis no és obligatòria. Nomès s'avaluaran els exercicis entregats en les dates fixades. En qualsevol cas, és molt recomenat fer tots els exercicis proposats, ja que algunes preguntes dels exàmens poden estar inspirades en ells o requerir desenvolupaments similars.

Els exàmens es realitzen a aules d'ordinadors, tot i que gran part de l'examen generalment no ho requereix.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Quarteroni, A.; Saleri, F. Scientific computing with MATLAB and octave [en línia]. 3rd ed. Heidelberg: Springer, 2010 [Consulta: 20/06/2023]. Disponible a: <https://link-springer-com.recursos.biblioteca.upc.edu/book/10.1007/978-3-642-12430-3>. ISBN 9786613569660.
- Stoer, J.; Bulirsch, R. Introduction to numerical analysis. 3rd ed. Springer-Verlag, 2002. ISBN 9781441930064.
- Aubanell, A.; Benseny, A.; Delshams, A. Eines bàsiques de càlcul numèric : amb 87 problemes resolts. Universitat Autònoma de Barcelona, 1991. ISBN 847929230X.

Complementària:

- Press, W.H. [et al.]. Numerical recipes : the art of scientific computing. Cambridge University Press, 1986.
- Isaacson, E.; Keller, H. B. Analysis of numerical methods. Dover, 1994.