

Методы вычислений

(Хромов К.Ю., кфмн, ИАЭ)

Методы вычислений

1. Представление чисел в машине. Типы float, double и ошибки округления. Примеры неустойчивых алгоритмов и чувствительности задач к начальным условиям. Вычисления значения функций
2. Решения нелинейных уравнений. Методы бисекции, Ньютона, секущих. Действительные и комплексные корни. Оценка сходимости.
3. Интерполяция. Интерполяция полиномами. Интерполяционный полином Лагранжа. Проблема аппроксимации при глобальной полиномиальной интерполяции. Интерполяция сплайнами. Граничные условия, естественные сплайны.
4. Численное дифференцирование. Определение оптимального шага для численного дифференцирования
5. Численное решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Методы Рунге-Кутты и Адамса, схема предиктор-корректор. Оценка локальной ошибки приближенного решения.
6. Численное интегрирование. Методы прямоугольников, трапеций и Симпсона. Интегрирование методом Гаусса.
7. Решение систем нелинейных уравнений. Оптимизация.
8. Краевая задача для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод стрельбы.
9. Методы генерации случайных чисел. Методы Монте-Карло. Многомерные интегралы.
10. Быстрое преобразование Фурье.

Численные методы линейной алгебры

1. Решение системы линейных уравнений по Гауссу. Выбор главного элемента для повышения устойчивости алгоритма.
2. LU разложение матрицы. Решение систем линейных уравнений с помощью LU разложения, вычисление обратной матрицы и определителей
3. Собственные числа и собственные значения матриц. Свойства симметричных, эрмитовых, ортогональных и унитарных матриц.
4. Нахождение собственных чисел и собственных векторов симметричной матрицы методом вращения Якоби.
5. Матрицы вращения. Приведение матрицы к трехдиагональному виду последовательностью преобразований с матрицами вращения. Вращение по Хаусхолдеру и вращение по Гивенсу.
6. 6 QL и QR алгоритмы.
7. Решение обобщенной задачи на собственные значения. Разложение Холецкого симметричной положительно определенной матрицы.
8. Решение систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений.
9. SVD разложение матрицы. Метод наименьших квадратов. Построение ортогонального базиса.

Программы и библиотеки для научных и инженерных расчетов

1. Введение в программирование на языке командного интерпретатора shell.
2. Визуализация результатов. Программа Gnuplot.
3. Автоматизация разработки программ. Команда make. Создание Makefile.
4. Библиотеки математических и статистических подпрограмм NAG, IMSL, Numerical Recipes, библиотеки для задач линейной алгебры BLAS и LAPACK.

Семинарские занятия

1. Программирование на shell, визуализация с помощью gnuplot, создание makefile.
2. Решение нелинейных уравнений одного неизвестного.
3. Интерполяция полиномами и сплайнами.
4. Численное дифференцирование.
5. Численное интегрирование.
6. Численное решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений.
7. Решение системы линейных уравнений по Гауссу.
8. Решение систем линейных уравнений с помощью LU разложения, вычисление обратной матрицы и определителей.
9. Нахождение собственных чисел и собственных векторов симметричной матрицы методом вращения Якоби.
10. Нахождение собственных чисел и собственных векторов симметричной матрицы с помощью QR, QL алгоритмов.
11. Решение обобщенной задачи на собственные значения.
12. Решение систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений.
13. SVD разложение матрицы. Метод наименьших квадратов.
14. Построение ортогонального базиса.

Рекомендуемая литература

1. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Бином, 2004.
2. Форсайт Дж., Малкольм М., Моулер К. Математические методы машинных вычислений. – М.: Мир, 1980.
3. Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику – М.: МФТИ, 1994.
4. Парлетт Б. Симметрическая проблема собственных значений – М.: Мир, 1983.
5. Кнут Д. Искусство программирования для ЭВМ – Вильямс, 2000.
6. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике – М.: Мир, 1990.