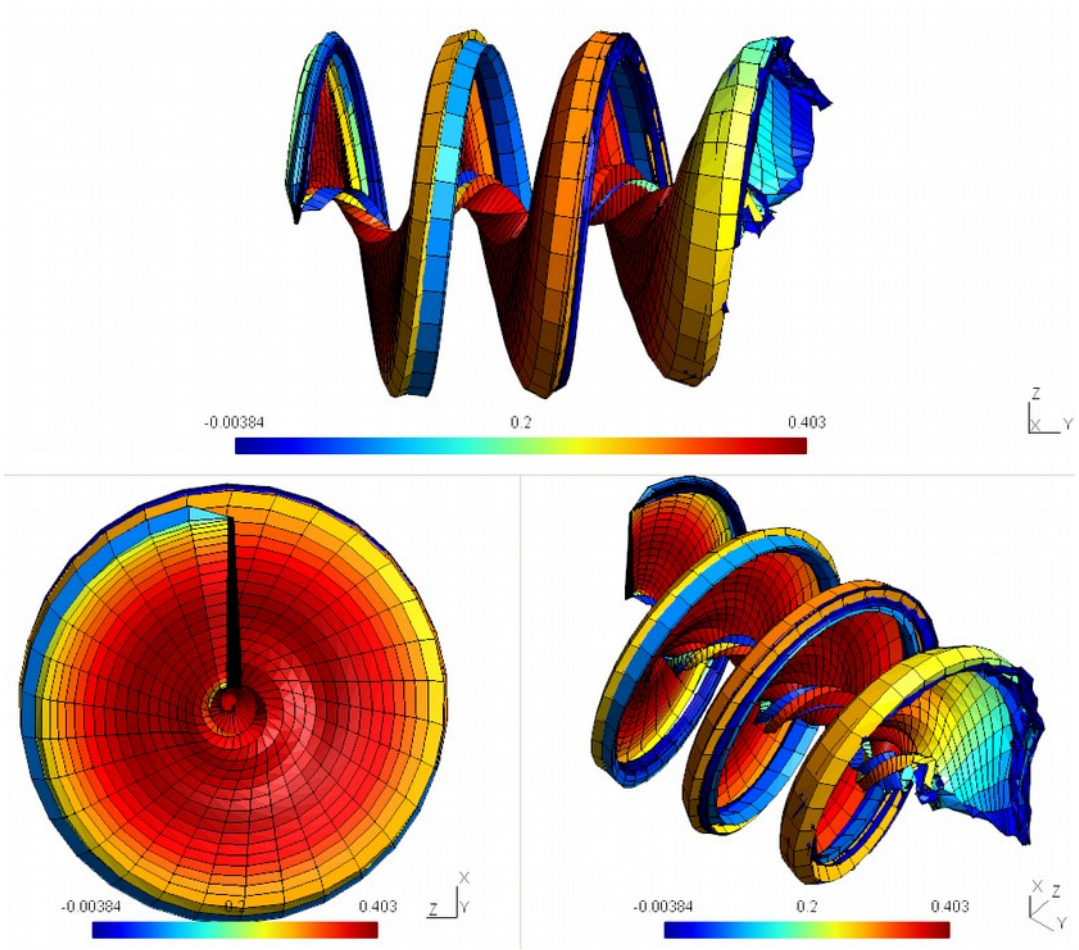
FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES



Elementos de Cálculo Numérico (M212)

Profesor Nicolás G Tripp

Aula virtual
http://fcen.uncuyo.edu.ar/elementos-de-calculo-numerico

Unidad 1: Introducción a la programación científica y al cálculo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Bibliografía básica

- Mathews J., Fink K.,“Métodos Numéricos con MATLAB”, Prentice Hall, 2000.
- Chapra S., Canale. R.,"Métodos Numéricos para Ingenieros", McGraw-Hill, 1999.

Bibliografía complementaria

- Eaton J., Bateman D., Hauberg S., Wehbring R.,“GNU Octave – Free your numbers”, 4 Ed,
Free Software Foundation, 2016
- Kiusalaas J.,”Numerical Methods in Engineering with MATLAB”, Cambridge University
Press, 2005.
- Quarteroni A., Saleri F.,"Scientific Computing with MATLAB and Octave". 2 Ed, Springer,

Unidad 1: Introducción a la programación científica y al cálculo

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Temario:

- Diferencias entre sistemas reales, modelos matemáticos y modelos numéricos.
- Solución numérica de problemas de ciencias e ingeniería.
- Identificación de errores en la aproximación discreta y en la solución numérica.
- Aritmética de las computadoras digitales.
- Introducción al lenguaje GNU Octave.
- Elementos básicos de programación (variables, estructuras, ciclos, condicionales, entrada-salida de datos).
- Buenas prácticas de programación.

Modelación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Los científicos **simplifican la realidad** para intentar comprender sus grandes misterios.

Esta simplificación o **aproximación** se hace en base a **modelos** que incluyen hipótesis, axiomas, leyes, etc, y se plasman en **ecuaciones matemáticas**. La validez de los modelos se justifica mediante observaciones de la Naturaleza y experimentos controlados de laboratorio.
Algunos ejemplos son: las leyes de Newton, la hipótesis del continuo, la leyes de Maxwell del electromagnetismo, la ley de Fourier para conducción del calor, la ley de Hooke para elasticidad de materiales.

Sin embargo, los modelos matemáticos no dejan de ser simplificaciones y **pueden albergar errores que llevan a conclusiones erradas**. La gran ley de Newton no podía explicar la trayectoria del planeta Mercurio y se formuló la existencia de un planeta ficticio para explicar las observaciones. Con la publicación de la teoría de la relatividad se logró detectar que el error provenía de la ley de Newton. (http://halley.uis.edu.co/aire/?p=684)

Modelación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Cuando las ecuaciones o el dominio donde debe encontrarse la solución son muy complejos, se recurre a **aproximaciones del modelo matemático** mediante métodos numéricos.

Las ecuaciones se pueden **aproximar mediante representaciones más simples**. Estas representaciones producen errores, por ejemplo cuando se utilizan series infinitas se descartan los términos de mayor orden de error y se produce un **error de truncamiento**.

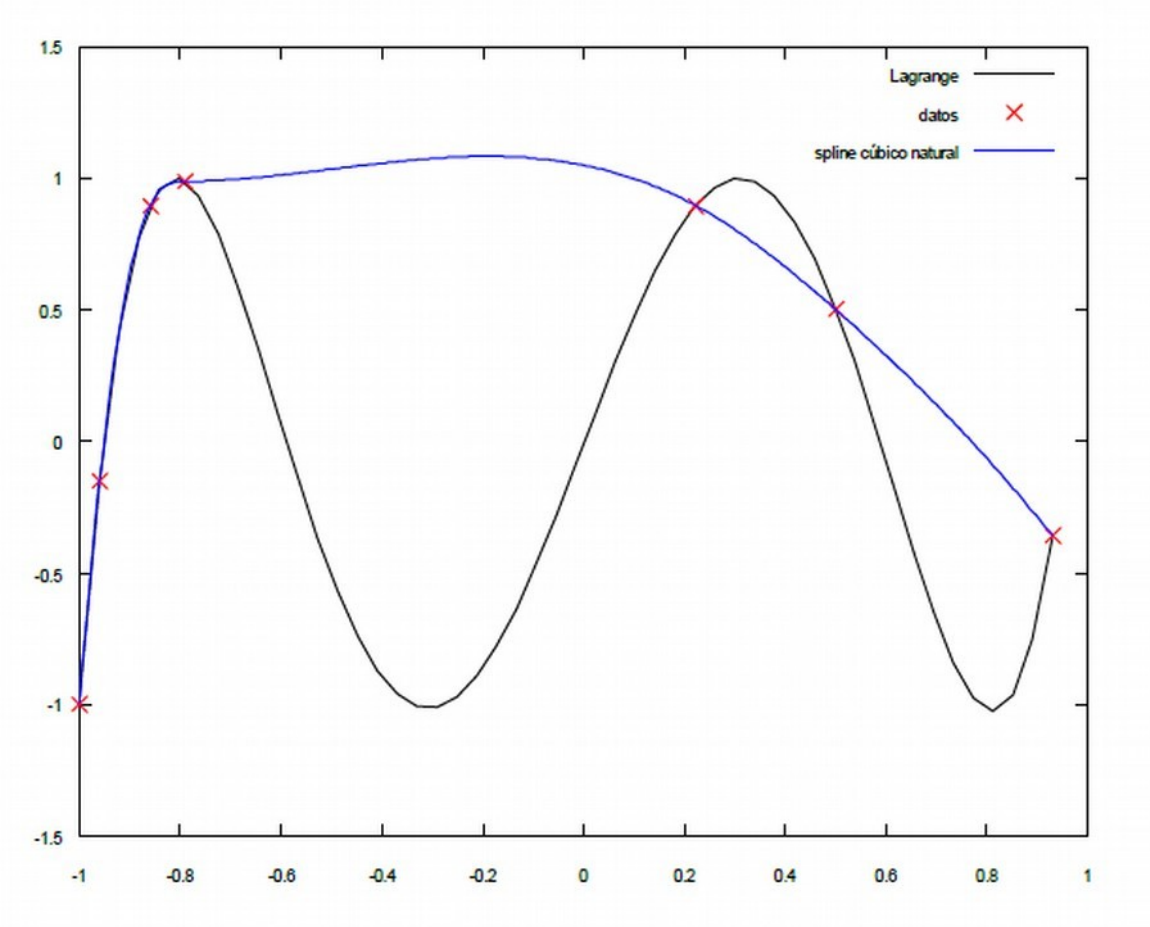
A su vez, el modelo se puede resolver en un **subdominio más simple** mediante la "discretización". Al discretizar, se utiliza alguna hipótesis adicional para completar el subdominio y obtener el dominio original, pero esta hipótesis produce un **error de discretizado**.

Finalmente, al utilizar la computadora, la cantidad de números que puede representar es finita e introduce **error de redondeo**.

Solución numérica de problemas de ciencias e ingeniería

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Interpolación de datos experimentales



Solución numérica de problemas de ciencias e ingeniería

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Solución de integrales con singularidades

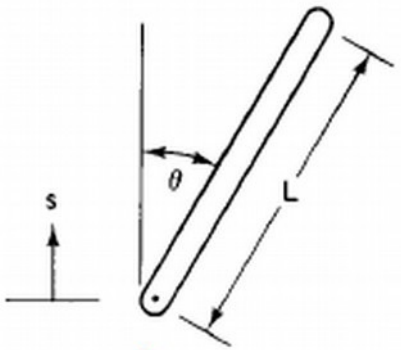
$$\int_{0,8}^{1} \frac{\log(1-x)}{\sqrt{(1-x^2)}}\,dx$$

Subintervalos (n)	Integral (I)	Error relativo $(I_{j+1}-I_j)/ I_j$
1E+0	-0,37284	---
1E+1	-1,16144	2,115
1E+2	-1,79069	0,542
1E+3	-2,09809	0,172
1E+4	-2,22727	0,062
1E+5	-2,27810	0,02281
1E+6	-2,29733	0,00843
1E+7	-2,30440	0,00309
1E+8	-2,30695	0,00113
1E+9	-2,30786	3,9E-4

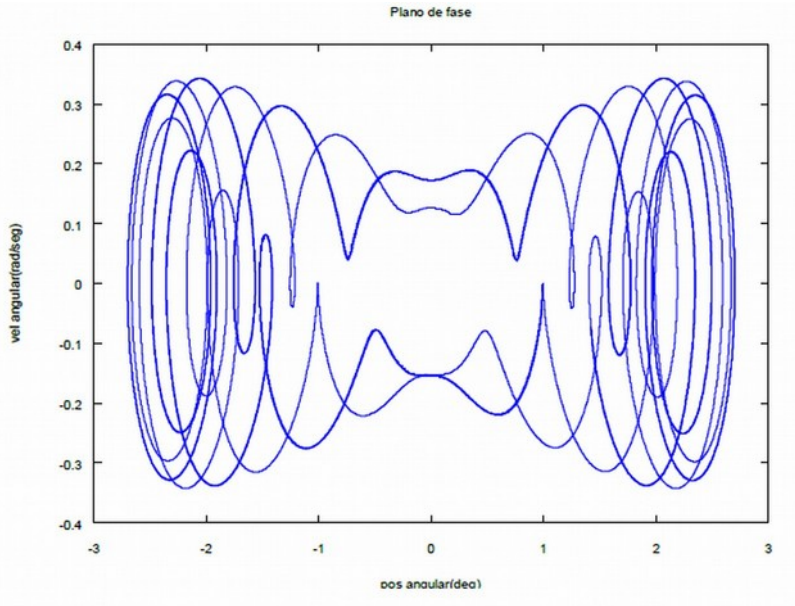
Solución numérica de problemas de ciencias e ingeniería

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Estabilidad del péndulo invertido



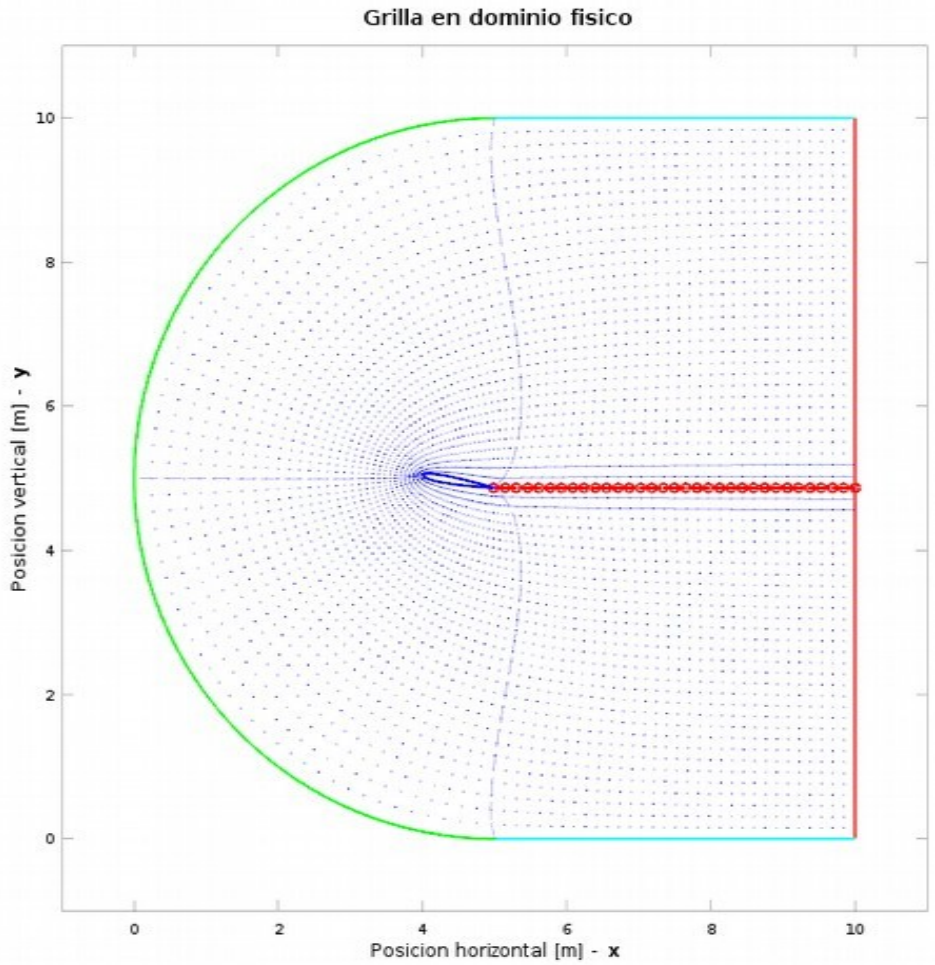
$$\ddot{\theta}(t)=\frac{3}{2L}(g-Aw^2\sin wt)\sin\theta(t)$$

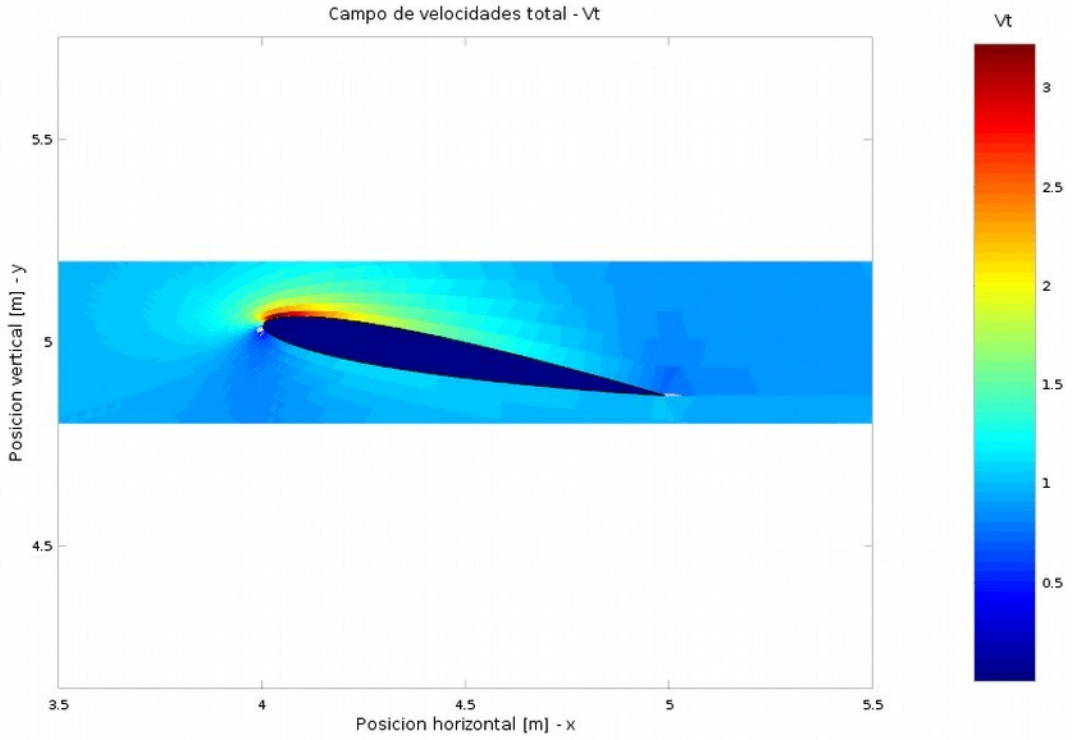


Solución numérica de problemas de ciencias e ingeniería

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Flujo alrededor de álabes





Aritmética de las computadoras digitales

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Representación digital de números

Se usan 3 números enteros

s: bit de signo, puede ser 0 o 1

C: mantisa, significando o coeficiente

b: base, suele ser 2

q: exponente

$$(-1)^s \, x \, C \, x \, b^q$$

Ejemplo:

s=1, C=12345, q=-3

Número=(-1)*12345*0,001=-12,345

Aritmética de las computadoras digitales

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Representación digital de números - continuación

La computadora trabaja con **sistema binario**. Cada registro de la memoria almacena “bits” que pueden tomar el valor 0 o el 1.

Los números enteros se almacenan en formato binario según la cantidad de bits disponibles.

El **estándar IEEE-754** fija principalmente dos estándares de precisión:
simple precisión de 32 bits (s:1bit q:8bits c:23bits) puede representar números reales entre 2,938736E-39 y 1,701412E+38
doble precisión de 64 bits (s:1bit q:11bits c:52bits) puede representar números reales entre 5,562684646268003E-309 y 8,98846567431158OE+307

Aritmética de las computadoras digitales

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Operaciones de punto flotante

Suma y resta: se alinean los bits (se aumenta altera la mantisa del número de menor exponente) y se suman o restan.

$$123456.7 + 101.7654 = (1.234567 \times 10^5) + (1.017654 \times 10^2)$$

$$= (1.234567 \times 10^5) + (0.001017654 \times 10^5) = (1.234567 + 0.001017654) \times 10^5 = 1.235584654 \times 10^5$$

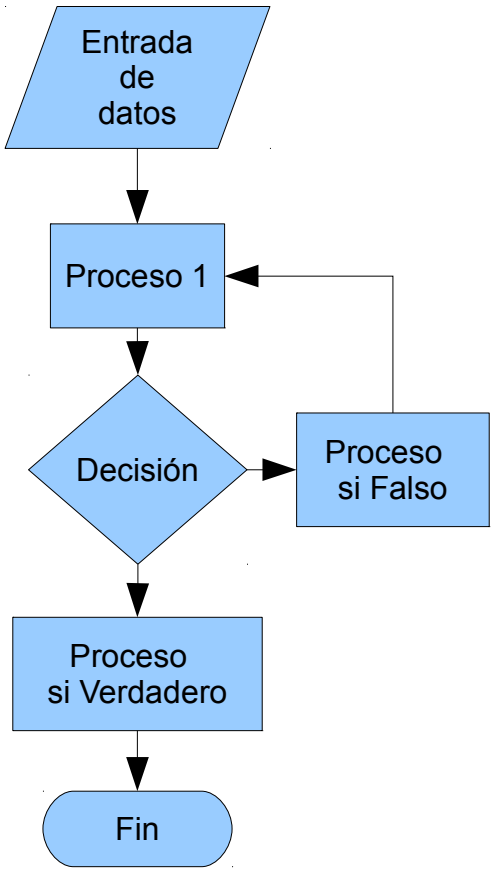
Multiplicación y división: se multiplican o dividen las mantisas y se suman o restan los exponentes.

Si el resultado de las operaciones excede la precisión disponible, la computadora redondea y aparecen **errores de redondeo**.

Elementos básicos de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Diagrama de flujo, pseudocódigo y código fuente



Pseudocódigo:

1.Leer datos
2.Ejecutar P1
3.Preguntar si cumple una condición
4.Si es verdadero realizar V
5.Si es falso realizar F y volver a P1
6.Fin

Código fuente:

```
Function test()
input=csvread('archivo.csv')
var1=P1(input)
while cond != True
If cond1==True
      PV
else
      PF
endif
endfunction
```

Elementos básicos de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Tipos de variables

- Enteros (“Integer”): 1,2,3,4,...
- Reales (“Real”): 1,025849
- Caracteres (“string”): “texto”
- Lógicos (“Logical”): Verdadero (“True”) o Falso (“False”)

Arreglos

- Vector fila: A(1,columna) [0,1,2,3,4,5]
- Vector columna: A(fila,1) [0,1,2,3,4,5]'
- Matriz: A(fila,columna)[1,2,3,4 ; 2,4,5,6; 3,5,6,7]

$$[0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5]$$

$$[0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5]^T$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 5 & 6 & 7 \end{bmatrix}$$

Elementos básicos de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Operaciones aritméticas

Asignar (=)
Sumar y restar (+ -)
Multiplicar (*)
Dividir (/)

Comparadores lógicos

es igual que (==)
es mayor igual que (>=)
es menor igual que (<=)
es distinto que (!=)

Elementos básicos de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Bucle "For": realiza una operación un número determinado de veces.

```
for i=1:10
    a=a+1
endfor
```

Bucle "While": realiza una operación mientras se mantenga una condición lógica.

```
while a<=10
    a=a+1
endwhile
```

Elementos básicos de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Condicionales

El control “IF-Then-Else” ejecuta una acción solamente si se cumple la condición lógica.

```
If a<=10
    a=a+1
elseif a<=20
    a=a+2
else
    a=a+10
endif
```

Introducción a la programación científica

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Jerarquía de lenguajes de programación

- Bajo nivel: Assembler
- Nivel intermedio: Fortran, C, C++, Java
- Alto nivel: Matlab, Octave, Python

A medida que se aumenta el nivel de jerarquía, más trabajo realiza la computadora y menos trabajo realiza el programador. El lenguaje se vuelve menos máquina y más humano. El costo es una pérdida de rendimiento

Los lenguajes de bajo nivel se utilizan para programaciones sencillas. Los lenguajes de alto nivel se utilizan para realizar “códigos prototipo”.

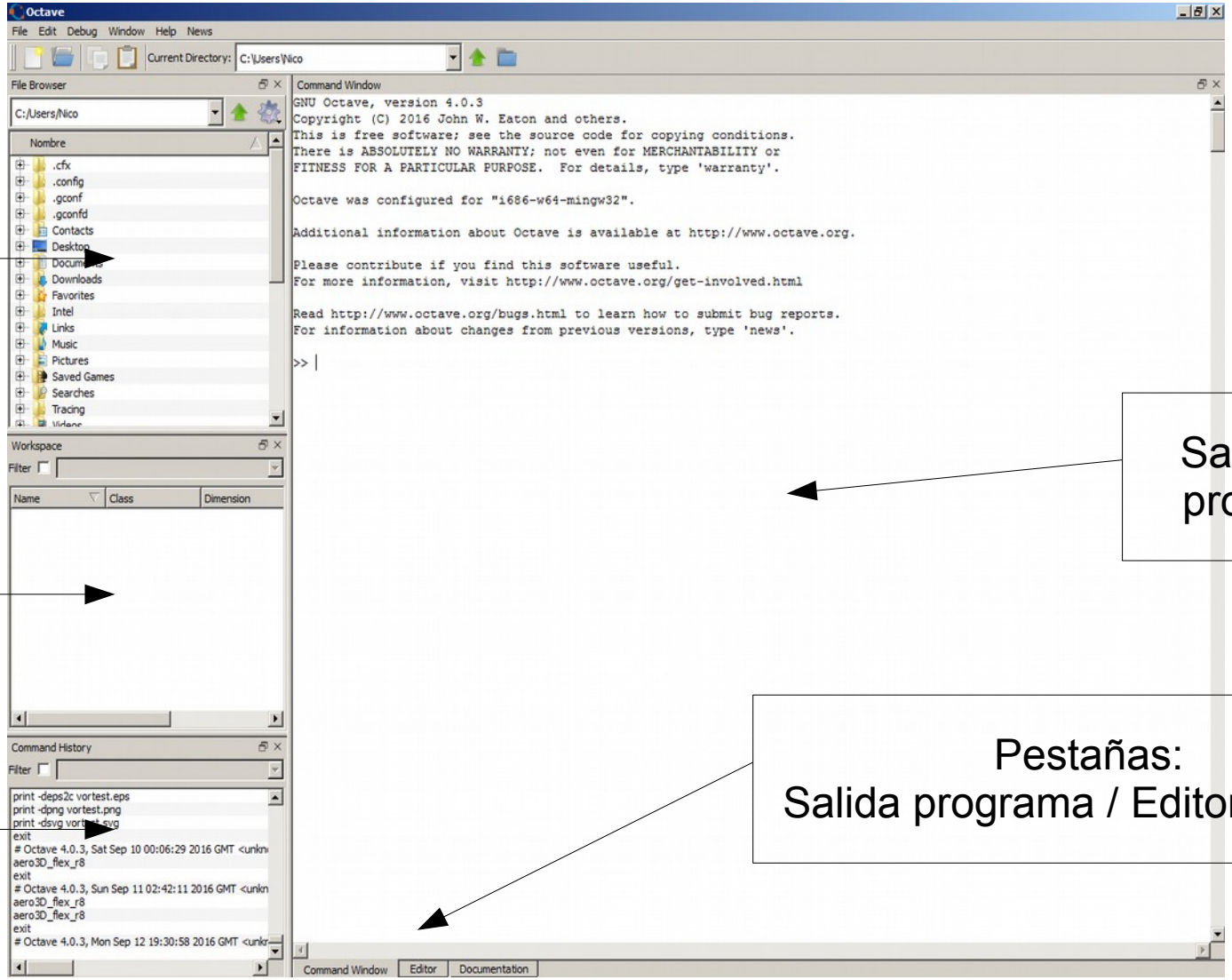
Introducción al lenguaje GNU Octave

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Archivos en carpeta de trabajo

Variables en Memoria

Historial de comandos



Salida del programa

Pestañas:
Salida programa / Editor / Ayuda

Buenas prácticas de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

"Best Practices for Scientific Programming" Wilson et al 2012

> “Software is just **another kind of experimental apparatus** and should be **built, checked, and used** as carefully as any physical apparatus. However, while most scientists are careful to validate their laboratory and field equipment, **most do not know how reliable their software is**. This can lead to **serious errors** impacting the central conclusions of published research.”

Buenas prácticas de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Redacción "Write programs **for people,** not computers"

"First, a program should not require its readers to hold more than a handful of facts in memory at once. The primary way to accomplish this is to **break programs up into easily understood functions**, each of which conducts a single, easily understood, task. This serves to make each piece of the program easier to understand in the same way that breaking up a scientific paper using sections and paragraphs makes it easier to read."

"**Names should be consistent, distinctive, and meaningful**"

"**Code style** and formatting should be consistent. If different parts of a scientific paper used different formatting and capitalization, it would make that paper more difficult to read."

Buenas prácticas de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Automatización de tareas repetitivas

"In practice, scientists should **rely on the computer to repeat tasks** and save recent commands in a file for re-use"

"**Careful record keeping** is fundamental to science of all kinds. **Just as lab notebooks** are considered crucial to document work at the bench, it is important to have a detailed record of the data manipulation and calculations that have been performed using computers."

Buenas prácticas de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Revisiones

"Make incremental changes."

"Use version control...
...Two of the biggest challenges scientists and other programmers face when working with code and data are keeping track of changes (and being able to revert them if things go wrong), and collaborating on a program or dataset.
Typical "solutions" are to email software to colleagues or to copy successive versions of it to a shared folder"

"Don't repeat yourself (or others)...
...follow the DRY Principle, for "don't repeat yourself", which applies to both data and code…
...code should be modularized rather than copied and pasted"

Control de calidad

A debugger allows users to pause a program at any line (or when some condition is true), inspect the values of variables, and walk up and down active function calls to figure out why things are behaving the way they are.
Debuggers are usually more productive than adding and removing print statements or scrolling through hundreds of lines of log output, because they allow the user to see exactly how the code is executing rather than just snapshots of state of the program at a few moments in time. In other words, the debugger allows the scientist to witness what is going wrong directly, rather than having to anticipate the error or infer the problem using indirect evidence.

Use a variety of oracles. An oracle is something which tells a developer how a program should behave or what its output should be. In commercial software development, the oracle is often a contract or specification written by a business specialist. In scientific research, oracles include analytic results (e.g., closed-form solutions to special cases or simplified versions of the problem), experimental results, and results produced by earlier, trusted, programs. These can all provide useful checks, so programmers should use all available oracles when testing programs.

Buenas prácticas de programación

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Documentación y mejora continua

"Document design and purpose, not mechanics
Reference documentation and descriptions of design decisions are key for improving the understandability of code. We recommend that scientific programmers document interfaces and reasons, not implementations. If a piece of code requires substantial description of the implementation to be understandable, it is generally recommended that rather than write a paragraph to explain a complex piece of code, reorganize the code itself so that it doesn't need such an explanation."

"Collaborate.
In the same way that having manuscripts reviewed by other scientists can reduce errors and make research easier to understand, reviews of source code can eliminate bugs and improve readability"