

KOMPUTEROWE METODY OBLICZENIOWE

2023/2024

dr Marek Brancewicz

Uniwersytet w Białymstoku

Wydział Fizyki, pokój 1057

m.brancewicz@uwb.edu.pl

ver. 09.01.2024

1. Wprowadzenie

03.10.2023

- 1) Organizacja zajęć
- 2) Literatura
- 3) Tematyka zajęć:
 - LibreOffice CALC (arkusz kalkulacyjny)
 - OCTAVE (obliczenia numeryczne)
 - MAXIMA (obliczenia symboliczne, dodatkowo)
- 4) Warunki i kryteria zalicznienia

1. Literatura

03.10.2022

- [1] P.J.G. Long, *"Introduction to Octave"*, 2005
(<http://www-mdp.eng.cam.ac.uk/web/CD/engapps/octave/octavetut.pdf>)
- [2] J.W. Eaton, D. Bateman, S. Hauberg, R. Wehbring, *"GNU Octave. A high level interactive language for numerical computations"*, Edition 4 for Octave version 4.4.1, August 2018
(<https://octave.org/octave.pdf>)
- [3] Richard H. Rand, *"Introduction to Maxima"*
(<https://maxima.sourceforge.io/docs/manual/intromax.pdf>)
- [4] Official *"Maxima Manual"*
(<https://www-users.mat.umk.pl/~much/MK/samouczki/maxima.pdf>)
- [5] Inne dowolne źródła internetowe

1. Harmonogram

03.10.2022

- 1) Wprowadzenie (03.10.2023)
- 2) LibreOffice CALC (17.10.2023, 24.10.2023)
- 3) OCTAVE (31.10.2023, 07.11.2023, 14.11.2023, 21.11.2023, 28.11.2023, 05.12.2023, 12.12.2023, 19.12.2023, 09.01.2024, 16.01.2024, 23.01.2024)
- 4) Test zaliczeniowy (30.01.2024)

2. LibreOffice CALC

17.10.2022

- Regresja liniowa

3. LibreOffice CALC

24.10.2022

- Dopasowania wieloparametrowe
- Analiza fragmentu widma XRD

4. OCTAVE

31.10.2023

- Omówienie interfejsu programu OCTAVE i sposobu posługiwania się nim
- Podstawowe funkcje ułatwiające pracę z programem (*pwd*, *clc*, *clear*, *who*, *whos*)
- Podstawowe działania na liczbach i podstawowe funkcje matematyczne
- Tworzenie i podstawowe działania na zmiennych
- Tworzenie tablic przez wypisywanie i dopisywanie elementów, dostęp do elementów lub fragmentów tablicy, macierze specjalne (funkcje *ones*, *zeros*)
- Działania na tablicach liczb (wektorowe, "element po elemencie")

5. OCTAVE

07.11.2023

- Skrypty; tworzenie, edycja i uruchamianie
- Zmienne boolowskie i wyrażenia logiczne (`==`, `!=`, `<`, `>`, `~`, *and*, *or*, *xor*, *not*)
- Operacje logiczne na macierzach danych liczbowych (wybieranie elementów spełniających odpowiednie warunki)
- Instrukcja warunkowa (`if`) oraz wielokrotnego wyboru (`switch`)

6. OCTAVE

14.11.2023

- Pętle (for, do, while)
- Generator liczb losowych (rand, randn, rande), rysowanie histogramów (funkcja *hist*)
- Wykresy punktowe i liniowe 2D (funkcja *plot*, *scatter* i ich podstawowe opcje)
- Wykresy wielopanelowe (funkcja *subplot*)

ZADANIE - PĘTLE

Napisz skrypt obliczający iloczyn skalarny dwóch wektorów (tablic 1D) o dowolnym rozmiarze. Dwa wektory wpisz w skrypcie ręcznie. Obliczenia wykonaj oddzielnie (ale w tym samym skrypcie) z wykorzystaniem pętli: FOR, DO i WHILE. Wynik działania wypisz za każdym razem w Command Window. Program powinien działać dla dwóch tablic danych jednakowej, lecz dowolnej długości, które zostaną do niego wpisane. Porównaj wynik z wynikiem prostego działania wektorowego.

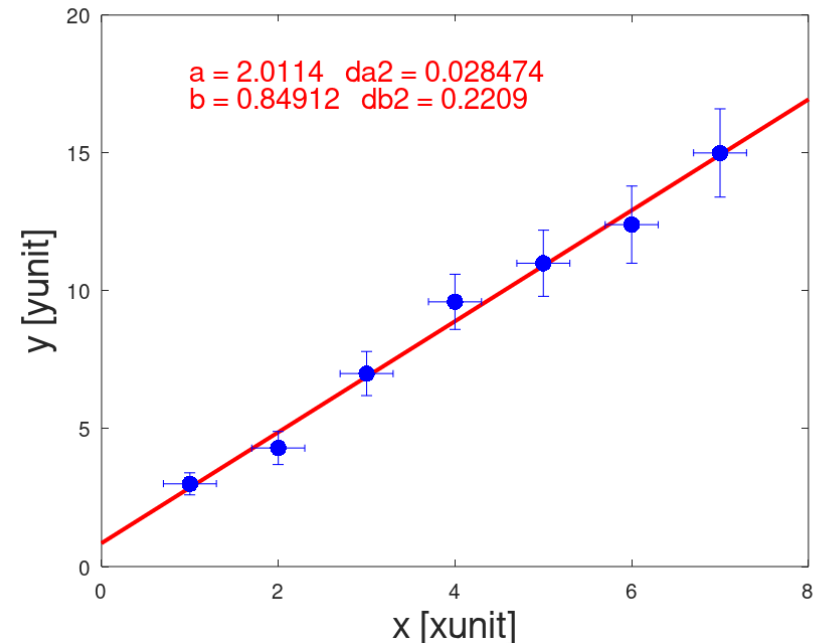
7. OCTAVE - ćwiczenia

21.11.2023

REGRESJA LINIOWA

Napisz prosty skrypt w OCTAVE, który na podstawie serii danych pomiarowych w formacie $d=[x,y,dx,dy]$ obliczy współczynniki regresji liniowej wraz z niepewnościami.

Program powinien wypisać w konsoli (Command Window) lub na wykresie obliczone wartości parametrów a i b wraz z niepewnościami oraz narysować wykres, na którym pokazane będą punkty eksperymentalne (x,y) , niepewności pomiarowe (dx,dy) oraz dopasowana prosta $y=ax+b$.



8. OCTAVE

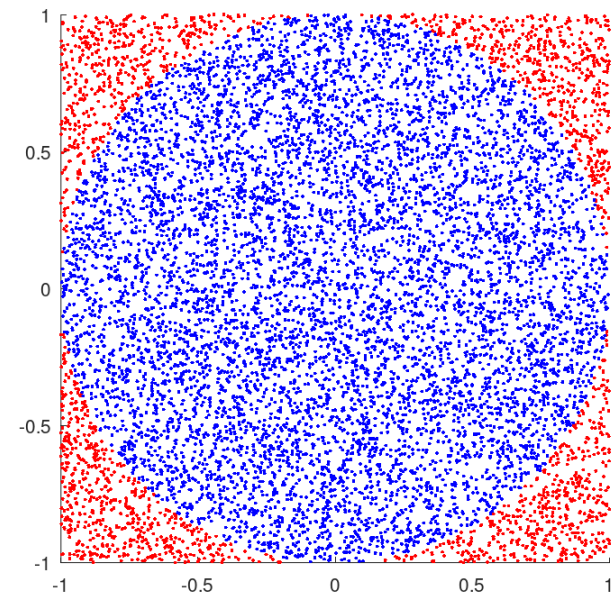
28.11.2023

- Metody Monte Carlo

OBLICZANIE π METODĄ MONTE CARLO

Napisz skrypt, w którym wylosujesz równomiernie współrzędne n punktów wewnątrz kwadratu o dowolnym boku o długości $2a$ (a możesz wybrać dowolnie) i środka w punkcie $(0,0)$.

Przechowaj współrzędne punktów w tablicy. Spośród tych punktów wybierz te, które znajdą się wewnątrz koła o promieniu a i środka w punkcie $(0,0)$ i policz je. Zastanów się, czy znając liczbę tych punktów i wszystkich punktów jesteś w stanie oszacować wartość liczby π ? Co zrobić, aby ta wartość była dokładniejsza? Swoje obliczenia zobrazuj rysunkiem (tak jak obok, tu $a=1$, $n=10\ 000$).



9. OCTAVE

05.12.2023

- **POWTÓRZENIE I TEST SPRAWDZAJĄCY** – tworzenie macierzy, wybieranie ich elementów i fragmentów

10. OCTAVE

12.12.2023

- **RÓŻNICZKOWANIE NUMERYCZNE** funkcji określonej na dyskretnym rozkładzie
- **CAŁKOWANIE NUMERYCZNE** funkcji określonej na dyskretnym rozkładzie (metoda prostokątów, trapezów, Simpsona)

11. OCTAVE

19.12.2023

- Czytanie i zapisywanie danych do plików tekstowych

12. OCTAVE

09.01.2024

- Podstawowe wykresy 3D
- Rysowanie powierzchni w 3D (*surf*)
- Funkcja *meshgrid*

ZADANIE

Napisz program (skrypt), który na podstawie danych wejściowych, którymi będą współrzędne trzech narożników trójkąta w układzie XY narysuje trójwymiarowy wykres na siatce obejmującej ten trójkąt o wartościach Z zdefiniowanych następująco:

- $Z = 0$ wszędzie poza trójkątem,
- $Z = d_1^2 \cdot d_2^2 \cdot d_3^2$, wewnątrz trójkąta, gdzie d_1 , d_2 i d_3 są odpowiednio odległościami punktu wewnątrz trójkąta od jego boków.