

Pracownia metod numerycznych w chemii, ćwiczenie nr 1.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z błędami obliczeń numerycznych. Wymagane jest bezwzględnie co najmniej dostateczne posługiwanie się językiem C, C++, lub jakimś dialektem Fortranu.

Ćwiczenia

1. Wydrukuj z wszystkimi cyframi znaczącymi następujące stałe:
0.5E+00, 0.1E+00, 1.3E+00, 0.5D+00, 0.1D+00, 1.3D+00
E – liczba pojedynczej precyzji, D – liczba podwójnej precyzji.
Jakie różnice zauważasz? Skąd one się biorą?
2. Metodą eksperymentów numerycznych znajdź następujące stałe dla liczb pojedynczej i podwójnej precyzji:
 - (a) MAX – największą liczbę rzeczywistą;
 - (b) MIN – najmniejszą liczbę rzeczywistą;
 - (c) MACHEP – najmniejszą liczbę rzeczywistą większą od zera taką, że $\text{fl}(1.0+\text{MACHEP})>1$.
3. Napisz program wykonujący następującą operację:

$$S = \sum_{i=1}^n \delta$$

gdzie $n = K^7$; obie są typu int (INTEGER); a $\delta = 1.0/n$. Wykonaj obliczenia dla $K=4, 7, 8, 10$. Jaka jest dokładność wyniku w każdym przypadku? Jak można wytłumaczyć te różnice?

Wykorzystując otrzymany wynik odpowiedz na następujące pytania:

- (a) Czy jest celowe stosowanie rzeczywistych zmiennych sterujących pętli DO w Fortranie (w przeciwieństwie do C/C++/C# i Pascala nie jest to błąd składniowy)?
- (b) Czy prawidłowo postępuje numeryk, który dla oszczędności oblicza sumę wartości funkcji w danym przedziale następująco:

```
sumf:=0.0;  
x:=x0;  
for i:=1 to n do begin  
    x:=x+delta;  
    sumf:=sumf+f(x);  
end;
```

zamiast

```
sumf:=0.0;  
for i:=1 to n do begin  
    x:=x0+i*delta;  
    sumf:=sumf+f(x);  
end;
```

(bo przecież dodawanie kosztuje mniej od mnożenia).

Ocena ćwiczenia nr 1 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.