

Pracownia metod numerycznych w chemii, ćwiczenie nr 4.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z całkowaniem numerycznym szacowaniem błędów tej operacji.

Ćwiczenia

1. Napisać program całkowania numerycznego funkcji Gaussa

$$f(x) = \exp(-x^2/2)$$

jedną z następujących trzech metod:

- (a) trapezów,
- (b) Simpsona,
- (c) McLaurina.

Program powinien czytać granice całkowania oraz krok całkowania oraz drukować wartość całki jak również wartość „prawdziwą”, która jest dana funkcją $erf(x)$:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-x^2) dx$$

oraz różnicę między wartością wyliczoną i „prawdziwą”.

Uwaga! Aby porównać wartość całki z wartością funkcji erf należy w tej ostatniej wstawić odpowiednio przeskalowane x .

2. Uruchomić program wykonując całkowanie w granicach od 0 do 1 dla różnych wartości długości kroku h . Wykonać wykres różnicy między wartością obliczoną a „prawdziwą” dla różnych h i porównać różnice z oszacowaniem podanym na wykładzie.

Ocena ćwiczenia nr 4 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.

Ocena ćwiczenia nr 3 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.