

Pracownia metod numerycznych w chemii, ćwiczenie nr 6.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z rozwiązywaniem układu równań liniowych metodą Gaussa z wyborem elementu głównego, z wykorzystaniem dostępnej procedury bibliotecznej. Punkty 1 – 4 są obowiązkowe do wykonania a punkty 5 – 7 dodatkowe dla chętnych.

Ćwiczenia

1. Z katalogu `etoh.chem.univ.gda.pl:/big/staff/adam/NUM/Cw6` skopiuj pliki `gauss.f` i `machpd.f` (ten drugi określa dokładność maszynową i jest wołany przez podprogram GAUSS¹ z pliku `gauss.f`). Zapoznaj się z opisem zmiennych wejściowych i wyjściowych podprogramu GAUSS; jest on podany w liniach komentarza początkowej części pliku. Zwróć uwagę na zmienną MARK która wskazuje, czy macierz układu równań jest osobliwa. Zastanów się, dlaczego do podprogramu GAUSS należy przekazać zarówno liczbę równań/zmiennych (N) jak i zadeklarowany wymiar wierszowy macierzy układu (LDA).
2. Napisz program główny rozwiązujący układy równań liniowych z wykorzystaniem podprogramu GAUSS. Program główny powinien działać jak następuje:
 - (a) Pytać o nazwę pliku z danymi a następnie czytać ją a następnie otwierać ten plik. Jeżeli plik nie istnieje, program ma drukować odpowiedni komunikat i kończyć działanie.
 - (b) Pytać o nazwę pliku do którego należy zapisać wyniki a następnie otwierać ten plik ze statusem 'NEW'. Jeżeli plik już istnieje, program ma drukować odpowiedni komunikat i kończyć działanie.
 - (c) Czytać z pliku wejściowego rozmiar zadania (liczbę równań), macierz układu (**A**) i wektor wyrazów wolnych (**Y**). W przypadku wystąpienia błędu w czytaniu, program ma drukować odpowiedni komunikat i kończyć działanie.
 - (d) Rozwiązywać układ równań liniowych $\mathbf{A} \mathbf{X} = \mathbf{Y}$.
 - (e) Jeżeli macierz układu okaże się osobliwa, drukować tylko komunikat o tym.
 - (f) Jeżeli macierz układu nie jest osobliwa, drukować wektor rozwiązań.

Uwaga! Jeżeli nie masz jeszcze wprawy w operowaniu na plikach i przenoszeniu argumentów z linii poleceń do programu fortranowskiego możesz uprościć punkty 2a – 2c; czytać ze `stdin` (* lub 5) i pisać na `stdout` (* lub 6) albo czytać z pliku o numerze 1 (domyślna nazwa `fort.1`) a pisać do pliku o numerze 2 (domyślna nazwa `fort.2`).

3. Skompiluj program np. poleceniem podanym niżej (zakładając, że plik zawierający program główny nazywa się `uklad.f`):

```
f77 -o uklad uklad.f gauss.f machpd.f
```

4. Uruchom program dla następujących przykładów:

¹Program pochodzi z książki G. Engeln-Müllges, F. Uhlig, „Numerical algorithms with FORTRAN”

(a)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(b)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(c)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Sprawdź poprawność działania programu rozwiązując „ręcznie” podane układy równań.

5. „Poeksperymentuj” z wywoływaniem podprogramu GAUSS wstawiając N zamiast LDA. Czy program działa teraz poprawnie? Dlaczego?
6. Dopisz do programu główne sprawdzanie poprawności rozwiązania poprzez obliczenie $\mathbf{Y} = \mathbf{A} \mathbf{X}$ a następnie obliczenie różnic między elementami wejściowego i wyliczonego wektora \mathbf{Y} . Uwaga! Zarówno \mathbf{A} jak i \mathbf{Y} są niszczone podczas działania podprogramu GAUSS, więc należy zrobić ich kopie. Wykonaj zmodyfikowany program dla dowolnego wymyślonego przykładu (np. zarówno elementy macierzy \mathbf{A} jak i wektora \mathbf{Y} możesz wygenerować losowo). Kiedy różnice między \mathbf{Y} oryginalnym i wyliczonym *a posteriori* mogą być znaczące?
7. Zastanów się, w jaki sposób można wykorzystać podprogram GAUSS do odwracania macierzy kwadratowych. Napisz i przetestuj odpowiedni program.

Ocena ćwiczenia nr 6 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 6 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 6 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.