

Next: Modeling, Computers, and Error Up: Numerical Analysis for Chemical Previous: Numerical Analysis for Chemical

Contents

- Modeling, Computers, and Error Analysis
 - O Mathematical Modeling and Engineering Problem-Solving
 - A Simple Mathematical Model
 - O Computers and Software
 - The Software Development Process
 - Algorithm Design
 - Program Composition
 - Quality Control
 - O Approximations and Round-Off Errors
 - Significant Figures
 - Accuracy and Precision
 - Error Definitions
 - Truncation Errors and the Taylor Series
 - The Taylor Series
 - Using the Taylor Series to Estimate Truncation Errors
 - Numerical Differentiation
- Roots of Equations
 - Backeting Methods
 - Graphical Methods
 - The Bisection Method
 - The False-Position Method
 - O Open Methods
 - Simple Fixed-point Iteration
 - The Newton-Raphson Method
 - The Secant Method
 - Multiple Roots
 - Systems of Nonlinear Equations
 - O Roots of Polynomials
 - Polynomials in Engineering and Science
 - Computing with Polynomials
 - Conventional Methods
 - Root Location with Libraries and Packages
 - O Engineering Applications: Roots of Equations
- Linear Algebraic and Equations
 - Gauss Elimination
 - Solving Small Numbers of Equations
 - Naive Gauss Elimination
 - Pitfalls of Elimination Methods
 - Techniques for Improving Solutions
 - Complex Systems
 - Nonlinear Systems of Equations
 - Gauss-Jordan
 - O LU Decomposition and Matrix Inversion
 - LU Decomposition
 - The Matrix Inverse
 - Error Analysis and System Condition
 - O Special Matrices and Gauss-Seidel
 - Special Matrices
 - Gauss-Seidel
 - Linear Algebraic Equation with Libraries and Packages
 - O Engineering Applications: Linear Algebraic Equations
- Optimization
 - O One-dimensional Unconstrained Optimization
 - Golden-Section Search
 - Quadratic Interpolation
 - Newton's Method
 - O Multidimensional Unconstrained Optimization
 - Direct Methods
 - Gradient Methods
 - O Contrained Optimization
 - Linear Programming

- Optimization with Packages
- O Engineering Applications: Optimization
- Curve Fitting
 - O Least-Squares Regression
 - Linear Regression
 - General Linear Least-Squares
 - Nonlinear Regression
 - Interpolation
 - Newton's Divided-Difference Interpolating Polynomials
 - Lagrange Interpolating Polynomial
 - Spline Interpolation
 - Fourier Approximation
 - Curve Fitting with Sinusoidal Functions
 - Fourier Integral and Transform
 - Discrete Fourier Transform (DFT)
 - Fast Fourier Transform (FFT)
 - The Power Spectrum
 - Curve Fitting with Libraries and Packagies
 - O Engineering Applications: Curve Fitting
- Numerical Differentiation and Integration
 - O Newton-Cotes Integration of Equations
 - The Trapezoidal rule
 - Simpson's rule
 - Intergrations of Equations
 - Romberg integration
 - Gauss Quadrature
 - Improper integrals
 - Numerical Differentiation
 - High-accuracy differentiation formulas
 - Richardson extrapolation
 - Derivatives of unequally spaced data
 - Numerical integration/differentiation formulas with libraties and packages
 - O Engineering Applications: Numerical Integration and Differentiation
- Ordinary Differential Equations
 - O Runge-Kutta Methods
 - Euler's Method
 - Improvement of Euler's Method
 - Runge-Kutta Method
 - Systems of Equations
 - Adaptive Runge-Kutta Method
 - O Stiffness and Multistep Methods
 - Stiffness
 - Multistep Methods
 - O Boundary-Value and Engenvalue Problems
 - General Methods of Boundary-Value Problems
 - ODEs and Eigenvalues with Libraries and Packages
 - O Engineering Applications: Ordinary Differential Equations
- Partial Differential Equations
 - O Finite Difference: Elliptic Equations
 - The Laplace Equations
 - Solution Techniques
 - Boundary Conditions
 - The Control Volume Approach
 - O Finite Difference: Parabolic Equations
 - The Heat Conduction Equation
 - Explicit Methods
 - A Simple Implicit Method
 - The Crank-Nicholson Method
 - O Finite Element Method
 - Calculus of variation
 - Example: The shortest distance between two points
 - The Rayleigh-Ritz Method
 - The Collocation and Galerkin Method
 - Finite elements for ordinary-differential equations
 - O Engineering Applications: Partial Differential Equations
- Using Matlab
 - ㅇ 설치
 - o Matlab 기초

- 배열
- Customization
- Summary
- ㅇ 제어문
 - if, else, and elseif
 - switch
 - while
 - for
 - break
 - Summary
- o 함수만들기
- o Matlab에서 그림 그리기
 - plot 명령어
 - 고급 plot 명령어
 - 그림을 그리는 다른 명령어들
- 이 예제
 - Linear Equation
- Using Fortran
 - o 설치 및 사용법
 - MS Window에서 작동하는 포트란
 - Unix 머신에서 작동하는 포트란
 - Summary
 - ㅇ 데이터와 입출력
 - 기본적 구성
 - 기본적 데이터 타입
 - 입력과 출력에 관해
 - Redirection
 - Dimension
 - 데이터 초기화
 - Summary
 - ㅇ 제어문
 - STOP문
 - GOTO문

 - PAUSE문
 - CONTINUE문 ■ CALL문
 - RETURN문
 - IF문
 - DO문
 - Summary
 - ㅇ 부프로그램
 - FUNCTION
 - **SUBROUTINE**
 - 부프로그램 컴파일
 - 라이브러리 만들기
 - EXTERNAL 문 사용하기
 - IMSL 사용하기
- About this document ...

Abstract:

수치해석이라고 하는 과목은 간단히 얘기를 하면 수학식으로 표현된것을 실제 우리가 볼 수 있는 형태로 구현하는 방법에 대한 과목이다. 또한 이 수치해석이 필요한 이유는 대부분 실제 우리가 볼 수 있는 현상은 수학식으로 표현할 수 있고 이 렇게 표현된 식은 식 자체만으로는 쉽게 이해하기가 힘들다. 그러므로 수치해석이라는 과정을 거쳐서 실제화 한다고 볼 수 있다. 그렇지만 수치해석 방법들은 대부분은 간단하고 단순한 많은 계산 과정으로 구성이 되어 있다. 그러므로 이러한 간단하고 단순한 과정을 사람대신 해결할 수 있는 방법은 컴퓨터를 이용하는 방법이다. 컴퓨터가 발전하고 계산 속도가 향상됨에 따라서 수치해석이라는 부분에 대한 관심도 증가되고 있고 기존에 시도해보지 못한 여러가지 방법들이 시도되 고 있다.

이 과목에서는 자연현상을 수학적 모델로서 구성을 하고 이 모델을 수치해석 기법을 이용해서 컴퓨터로서 해결하는 방법 에 대해 다룬다. 모델을 만는 것은 여러분들이 이미 오래전부터 배워왔던 부분일 것이며 수치해석이라는 것도 또한 여러 분들이 종이와 손을 이용해서 해결했던 방법을 대부분 컴퓨터로 적용을 하는 것이다. 사용하는 언어로는 오랫동한 수치해 석에서 많이 쓰였던 포트란과 최근 10년동안 많이 쓰이고 있는 Matlab을 이용할 것이다. 두 언어에 대한 것은 APPENDIX 부분을 참고하기 바란다.



Next: Modeling, Computers, and Error Up: Numerical Analysis for Chemical Previous: Numerical Analysis for Chemical Taechul Lee 2001-11-29