Obsah

1 Úvod 1
1.1 Role počítače . . . 1
1.2 Výpočetní chyby . . . 2
1.2.1 Zobrazení čísel a zaokrouhlovací chyby . . . 3
1.3 Korektnost a podmíněnost úloh, stabilita algoritmů . . . 5
1.4 Příprava numerického řešení . . . 6

2 Základní výpočetní postupy 9
2.1 Konečné diference . . . 9
2.2 Interpolace . . . 12
2.2.1 Interpolace pomocí polynomů . . . 13
2.2.2 Racionální interpolace . . . 15
2.3 Numerická derivace . . . 16
2.4 Numerická kvadratura . . . 18
2.4.1 Newtonova–Cotesova metoda . . . 19
2.4.2 Richardsonova extrapolace a Rombergova kvadratura . . . 21
2.4.3 Poznámky k numerické kvadratuře . . . 24
2.5 Výpočet funkcí . . . 26
2.5.1 Výpočet funkcí vyjádřených nekonečnou řadou . . . 26
2.5.2 Asymptotické řady . . . 28
2.5.3 Rekurentní formule pro výpočet funkcí . . . 30
2.5.4 Řešení kvadratických a kubických rovnic . . . 32
2.6 Transcendentní rovnice . . . 33
2.7 Úlohy . . . 36
2.7.1 Van der Waalsova rovnice . . . 36
2.7.2 Kmity dvouatomových molekul . . . 37
2.7.3 Rozptyl v centrálním poli . . . 41
2.8 Příklady . . . 43

3 Počáteční úloha pro obyčejné diferenciální rovnice 47
3.1 Základní pojmy . . . 47
3.2 Eulerova metoda a problematika chyb . . . 49
3.3 Metody Rungeho-Kuttova typu . . . 51
3.4 Odhad lokální chyby a volba integračního kroku . . . 54
3.4.1 Richardsonova extrapolace . . . 54
3.4.2 RK metody se zabudovaným odhadem chyby . . . 55
3.4.3 Automatické řízení integračního kroku . . . 57
3.5 Doplňky pro výpočetní praxi . . . 58
3.5.1 Výstup v předepsaných bodech . . . 58
3.5.2 Implicitní výstup . . . 60
3.6 Soustavy s velkým tlumením (stiff-systémy) . . . 60
3.7 Úlohy . . . 64

3.7.1 Omezený problém tří těles 64
3.7.2 Metoda střelby pro řešení okrajové úlohy 66
3.7.3 Dynamické systémy : limitní cykly, bifurkace 67
3.8 Příklady 72

A Procedury ke kapitole 2 **78**
A.1 Poměrné diference: `DivDif` 78
A.2 Newtonova interpolace: `NewtInt` 78
A.3 Nevillův interpolační algoritmus: `PolInt` 79
A.4 Interpolace funkce dvou proměnných: `PolInt2` 80
A.5 Racionální interpolace: `RatInt` 80
A.6 Eulerova sumace: `EulSum` 81
A.7 Kořeny $f(x) = 0$: `RTBisect,RTSecant,RTNewton` 82
A.8 Numerická kvadratura: `Trapzd,QTrap,QSimp,QRomb` 84

B Procedury pro Cauchyho úlohu **87**

C Aproximace některých funkcí **101**
C.1 Cyklometrické funkce 101
C.2 Komplementární chybová funkce erfc(x) 101
C.3 Besselovy funkce $J_0, J_1, Y_0, Y_1, I_0, I_1, K_0, K_1$ 102
C.4 Legendrovy přidružené polynomy $P_l^m(x)$ 106