

Spis treści

Od autora	X
Obliczenia inżynierskie i naukowe	XII
Ostrzeżenia	XVII

I. Skuteczne

1. MATLAB i Octave	3
1.1. MATLAB i Octave	4
1.1.1. MATLAB	4
1.1.2. Octave: darmowy klon MATLAB-a	5
1.1.3. Porównanie	6
1.2. Zaczynamy!	8
1.3. Dokumentacja	10
2. Podstawowy obiekt: macierz	15
2.1. Tworzenie macierzy	15
2.2. Macierze specjalne	17
2.3. Praca z blokami macierzy	18
2.3.1. Odwoływanie się do elementów macierzy	19
2.4. Format wyświetlania wyników	22
2.5. Podstawowe operacje matematyczne na macierzach	23
2.6. Parametry macierzy	26
2.7. Macierze rozrzedzone	26
2.8. Macierze N -wymiarowe	29
2.9. Napisy	30
2.10. Zarządzanie utworzonymi obiektami	31
2.11. Zapis macierzy i innych danych do pliku	32

2.11.1. Formaty zapisu danych	32
2.11.2. Format binarny czy tekstowy?	33
3. Proste konstrukcje programistyczne	35
3.1. Instrukcje warunkowe	35
3.2. Pętle	38
3.3. Wektoryzacja kontra pętla	40
4. Inne sposoby organizacji danych	45
4.1. Struktury	45
4.2. Zmienne tablicowe	46
4.3. Inne typy numeryczne	47
5. Rozszerzanie możliwości środowiska	49
5.1. Skrypty	49
5.2. Funkcje	54
5.3. Zmienne globalne i statyczne	58
5.4. Funkcje jako parametry innych funkcji	61
5.5. Instrukcje ostrzegawcze	62
5.6. Funkcje anonimowe	64
5.7. Organizacja zbioru własnych funkcji i skryptów	65
6. Wizualizacja	67
6.1. Wykresy funkcji jednej zmiennej	67
6.1.1. Wykresy w skali liniowej	67
6.1.2. Wykres w skali logarytmicznej	70
6.2. Łączenie wykresów kilku funkcji na jednym obrazku	73
6.3. Wykresy funkcji dwóch zmiennych	78
6.3.1. Pole skalarne	78
6.3.2. Pole wektorowe	86
6.4. Animacja: dodawanie trzeciego wymiaru	87
6.5. Zapis wykresu do pliku	92
6.6. Elementy uzupełniające wykres	93
6.6.1. Elementy podstawowe	93
6.6.2. Modyfikacja parametrów linii wykresu	94
6.7. Wizualizacja macierzy	95
6.7.1. Podstawy	95
6.7.2. Polecenie imagesc jako odmienny sposób wizualizacji funkcji dwóch zmiennych	97
7. Typowe zadania numeryczne	99
7.1. Arytmetyka zmiennopozycyjna	101
7.2. Rozwiązywanie układów równań liniowych i liniowego zadania najmniejszych kwadratów	103
7.2.1. Układ równań liniowych	103
7.2.2. Liniowe zadanie najmniejszych kwadratów	107
7.2.3. Istotne szczegóły działania operatora „\”	109
7.2.4. Układy z wieloma prawymi stronami	111
7.2.5. Wykorzystanie rozkładów macierzy	112

7.2.6.	Macierze rozrzedzone	114
7.3.	Inne standardowe zadania algebry liniowej	118
7.4.	Interpolacja i dyskretna aproksymacja średniokwadratowa	126
7.4.1.	Aproksymacja ciągła	126
7.4.2.	Interpolacja dyskretna	129
7.5.	Dyskretna transformacja Fouriera	130
7.6.	Równania nieliniowe	133
7.6.1.	Nieliniowe równania skalarne. Równania wielomianowe	145
7.7.	Optymalizacja	149
7.7.1.	Programowanie liniowe w Octave	150
7.7.2.	Programowanie nieliniowe w Octave	152
7.8.	Całkowanie	155
7.9.	Równania różniczkowe zwyczajne	158
7.9.1.	Rodzina funkcji <i>ode*</i>	160
7.9.2.	Uniwersalna funkcja <i>lsode</i> z Octave	161
7.9.3.	Opcje pracy <i>solwerów</i>	167
7.10.	Równania różniczkowe cząstkowe	177
7.10.1.	Równanie reakcji-dyfuzji	178
8.	Przyspieszanie własnych funkcji i skryptów	188
8.1.	Pomiar czasu	188
8.2.	Prealokacja i wektoryzacja	189
8.3.	Wykorzystanie zoptymalizowanych bibliotek w Octave	190
8.4.	Skompilowane moduły	190
8.4.1.	Moduły w Octave	191
8.4.2.	Moduły MEX w MATLAB-ie	192

II. Szybkie

9.	Programy numeryczne w języku C	199
9.1.	Podstawy	199
9.2.	Typy numeryczne w C	202
9.3.	Stałe matematyczne i podstawowa biblioteka matematyczna	206
9.4.	Zapis danych do pliku	210
9.5.	Przekazywanie do programu argumentów z wiersza poleceń	216
9.6.	Wczytywanie danych z pliku w formacie tekstowym	218
9.7.	Macierze w pamięci komputera	221
9.8.	Wykorzystanie bibliotek fortranowskich	223
9.9.	Projekty złożone	226
9.9.1.	Tworzenie własnych bibliotek	231
9.9.2.	Polecenie <i>make</i> . Jak tworzyć plik <i>Makefile</i> ?	234
9.10.	Dodatkowe ułatwienia dla programisty	244
10.	Wybrane biblioteki numeryczne	248
10.1.	Biblioteki wielozadaniowe	249
10.1.1.	GNU Scientific Library (GSL)	249
10.1.2.	Intel Math Kernel Library (MKL)	254
10.1.3.	AMD Core Math Library (ACML)	255

10.2. Algebra liniowa — macierze gęste	258
10.2.1. BLAS, LAPACK i ich zoptymalizowane wersje	258
10.3. Algebra liniowa — macierze rozrzedzone	270
10.3.1. Reprezentacja macierzy rozrzedzonych	270
10.3.2. UMFPACK	273
10.4. Równania różniczkowe zwyczajne	280
10.5. Przegląd innych bibliotek numerycznych	290
11. Optymalizacja szybkości programów	293
11.1. Prawo Amdahla	295
11.2. Architektura procesora	298
11.2.1. Możliwości obliczeń zmiennopozycyjnych	299
11.2.2. Teoretyczne wydajności wybranych procesorów	305
11.3. Hierarchia pamięci	307
11.3.1. Pamięć podręczna — detale techniczne	308
11.4. Praktyczna optymalizacja implementacji programów numerycznych	311
11.4.1. Dobór opcji kompilacji	314
11.4.2. Optymalizowanie programów	317
11.4.3. Wykorzystanie zoptymalizowanych bibliotek	326
11.4.4. Skuteczne wykorzystanie pamięci podręcznej	326
11.4.5. Likwidacja i rozwijanie pętli	329
11.4.6. Wklejanie funkcji	331
11.4.7. Unikanie dzielenia	332
11.4.8. Wynoszenie niezmienników na zewnątrz pętli	332
11.4.9. Wektoryzacja	333
11.4.10. Wielowątkowość	337
11.4.11. Zmienne pojedynczej precyzji	349

III. Efektowne

12. Wizualizacja danych naukowych	353
12.1. Kilka podstawowych grzechów wizualizacji	353
13. OpenDX	358
13.1. Opis danych w formacie <i>General Array</i>	359
13.1.1. Pole dyskretyzowane na siatce regularnej	360
13.1.2. Pole dyskretyzowane na siatce nieregularnej	364
13.2. Przykłady wizualizacji w OpenDX	365
13.2.1. Wizualizacja dwuwymiarowego pola skalarnego na siatce regularnej	366
13.2.2. Wizualizacja trójwymiarowego pola skalarnego na siatce nieregularnej	370
13.2.3. Wizualizacja ewolucji dwuwymiarowego pola skalarnego	378
13.3. Wybrane moduły OpenDX	382
14. ParaView	389
14.1. Opis danych w formacie VTK	390
14.1.1. Pole dyskretyzowane na siatce regularnej	391
14.1.2. Pole dyskretyzowane na siatce nieregularnej	393
14.2. Przykłady wizualizacji w ParaView	394

14.2.1. Wizualizacja dwuwymiarowego pola skalarnego na siatce regularnej . . .	394
14.2.2. Wizualizacja trójwymiarowego pola skalarnego na siatce nieregularnej .	396
14.2.3. Wizualizacja ewolucji dwuwymiarowego pola skalarnego	398
14.3. Wybrane filtry ParaView	400
Bibliografia	403
Indeks	409