UNIVERSITÀ DI PISA

CALCOLO NUMERICO

PAOLO GHELARDONI

Academic year	2020/21
Course	INGEGNERIA CHIMICA
Code	520AA
Credits	6

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
CALCOLO NUMERICO	MAT/08	LEZIONI	60	LIDIA ACETO PAOLO GHELARDONI CECILIA MAGHERINI

Obiettivi di apprendimento

Conoscenze
Gli obiettivi del corso sono i seguenti:

1. fornire conoscenze riguardanti i metodi numerici di base e la analisi delle loro principali proprietà;
2. sviluppare la capacità dello studente all'utilizzo corretto e consapevole ed alla implementazione su calcolatore degli strumenti matematici introdotti.

Questo in vista del loro impiego nello studio, nell'analisi e nell'approfondimento dei fenomeni fisici e chimici e nella risoluzione dei problemi dell'Ingegneria.

Modalità di verifica delle conoscenze
Durante la prova scritta e orale, o in alternativa prova orale con elaborato, lo studente dovrà dimostrare di aver acquisito conoscenze sui contenuti del corso utilizzando strumenti e terminologia appropriata.

Capacità
Al termine del corso, lo studente avrà acquisito capacità riguardanti la scelta, il corretto utilizzo e l'implementazione su calcolatore di un metodo numerico.

Modalità di verifica delle capacità
Prova scritta in laboratorio informatico e prova orale, o a causa dell'emergenza sanitaria, prova orale con elaborato.

Comportamenti
Lo studente potrà acquisire sensibilità riguardanti l'utilizzo di un metodo numerico e la analisi della accuratezza e della affidabilità delle approssimazioni da esso fornite.

Modalità di verifica dei comportamenti
Prova scritta in laboratorio informatico e prova orale, o a causa dell'emergenza sanitaria, prova orale con elaborato.

Prerequisiti (conoscenze iniziali)
E' necessaria la conoscenza di nozioni fondamentali fornite durante corsi standard di Analisi Matematica ed Algebra Lineare. In maggior dettaglio:

1. Analisi Matematica: Funzioni e successioni, Limiti, Calcolo differenziale in una o piu' variabili, Sviluppi di Taylor, Calcolo integrale in una variabile, Problemi ai valori iniziali per sistemi di equazioni differenziali ordinarie;
2. Algebra Lineare: Spazi vettoriali, Sistemi lineari, Algebra delle matrici, Autovalori ed Autovettori.

Indicazioni metodologiche
Metodi di insegnamento:

1. Lezioni frontali
2. Esercitazioni in laboratorio informatico

Frequenza: consigliata

Programma (contenuti dell'insegnamento)

Il corso fornisce conoscenze riguardanti i seguenti argomenti:

1. ANALISI DELL'ERRORE: errore assoluto ed errore relativo. Tipologie di errore. Numeri di macchina. Rappresentazione mediante troncamento ed arrotondamento. Precisione di macchina. *Overflow* ed *Underflow*. Aritmetica finita. Condizionamento di un problema. Condizionamento delle quattro operazioni algebriche fondamentali;
2. APPROSSIMAZIONE DI ZERI DI FUNZIONE: Il metodo di bisezione: criteri di arresto, condizionamento del problema ed ordine di convergenza. Il metodo di Newton: convergenza locale ed ordine di convergenza quadratico per radici semplici. Il caso di radici multiple: convergenza lineare e ripristino dell'ordine quadratico per il caso di molteplicità esatta nota a priori. Metodi quasi-Newton.
3. RISOLUZIONE DI SISTEMI LINEARI E NON LINEARI: Casi semplici. Fattorizzazione LU: esistenza, unicità e costo computazionale. Matrici a diagonale dominante. Matrici simmetriche e definite positive: fattorizzazione LDLT e cenni sulla Cholesky. *Pivoting*. Condizionamento del problema. Metodi iterativi di base. Sistemi lineari sovradeterminati: soluzione nel senso dei minimi quadrati, metodo delle equazioni normali e cenni sul metodo basato sulla fattorizzazione QR. Il metodo di Newton per sistemi di equazioni non lineari.
4. APPROSSIMAZIONE DI FUNZIONI: Interpolazione polinomiale: esistenza ed unicità del polinomio interpolante. Forma di Lagrange. Cenni sulla analisi dell'errore. Il metodo dei minimi quadrati nel discreto.
5. INTEGRAZIONE NUMERICA: Formule di quadratura di tipo interpolatorio. Formule di Newton-Cotes: il metodo dei trapezi ed il metodo di Simpson semplici. Analisi dell'errore. Grado di precisione di una formula di quadratura e formule gaussiane (cenni). Analisi del condizionamento di un integrale definito e di una formula di quadratura. Metodo dei trapezi e di Simpson compositi e relativa analisi dell'errore.
6. METODI NUMERICI PER EQUAZIONI DIFFERENZIALI ORDINARIE: Metodi ad un passo. Errore locale di troncamento ed ordine di consistenza (o accuratezza). Analisi di convergenza. I metodi di Eulero esplicito, implicito e dei trapezi. Metodi Runge-Kutta: tavola di Butcher, metodi espliciti e impliciti. Analisi lineare di assoluta stabilità. Metodi A-stabili ed A(alfa)-stabili. Equazioni *Stiff*. Metodi lineari a più passi. Errore locale di troncamento ed ordine di consistenza. Zero stabilità. Teorema di convergenza e prima barriera di Dahlquist. Analisi lineare di assoluta stabiltà e seconda barriera di Dahlquist.
7. AMBIENTE DI CALCOLO MATLAB: Definizione di variabili scalari, vettori e matrici. Tipo di una variabile. Operatore due punti. Sottovettori e sottomatrici. Operatori aritmetici, relazionali e logici. Espressioni. Principali funzioni built-in. M-files di tipo script. Comandi per l'input e l'output dei dati. Comandi per il controllo del flusso di esecuzione. M-files di tipo function: parametri di input e di output. Principali comandi per la grafica in 2D.

Bibliografia e materiale didattico

Testi consigliati:

1. L.Brugnano, C.Magherini, A.Sestini. Calcolo Numerico, terza edizione. Masterbooks, Firenze 2014.
2. P.Ghelardoni, G.Gheri, P.Marzulli. Elementi di calcolo numerico (dispense disponibili in rete).
3. S.Attaway, MATLAB: A Practical Introduction to Programming and Problem Solving, Second Edition, Burlington, MA, Elsevier Inc., 2012 (o edizioni successive).
4. A.Campi, E.Di Nitto, D.Loiacono, A.Morzenti, P.Spoletini. Introduzione alla programmazione in Matlab. Esculapio, Bologna, 2011.

Indicazioni per non frequentanti

Non sussiste alcuna variazione per non frequentanti.

Modalità d'esame

L'esame svolto **in presenza** consisterà in:

1. **prova scritta in laboratorio informatico**;
2. **prova orale**.

Durante la prova scritta (2 ore) il candidato dovrà redigere alcuni codici in linguaggio Matlab per risolvere problemi di tipo numerico ed effettuare dei test di esecuzione dei medesimi.
In riferimento alla prova orale, il candidato dovrà dimostrare, usando terminologia appropriata, di aver appreso sufficienti nozioni sui criteri per la scelta di un metodo numerico, sulle sue modalità di utilizzo e sulle sue principali proprietà con particolare riferimento alla accuratezza della approssimazione fornita ed al costo computazionale richiesto per determinarla. La prova orale consisterà in un colloquio della durata media di trenta minuti tra il docente ed il candidato.
L'esame svolto **da remoto** consistera' invece in **prova orale con discussione di un elaborato**.
Per quanto concerne la preparazione dell'elaborato il candidato dovra':

1. scegliere due metodi numerici descritti durante le ore di lezione frontale di cui uno riguardante il capitolo sulla risoluzione numerica di equazioni non lineari oppure il capitolo sulla risoluzione di sistemi di equazioni. Il secondo metodo deve riguardare un capitolo diverso rispetto al primo;
2. scrivere codici Matlab che implementano i metodi scelti;
3. effettuare dei test numerici con tali codici applicandoli per risolvere particolari problemi, che lo studente può scegliere liberamente;
4. commentare i risultati ottenuti;
5. inviare al docente tramite posta elettronica entro la data e l'orario indicati sul portale Valutami un **unico** file zip denominato **Cognome_Nome.zip** contenente sia gli M-file redatti che un file pdf . In quest'ultimo dovranno essere riportati i codici Matlab, i test effettuati, i risultati ottenuti e i loro commenti;
6. saper descrivere al docente durante la prova orale che avra' una durata media di quarantacinque minuti il materiale contenuto in tale file e rispondere a domande su di esso.

Per la impostazione dell'elaborato il candidato potrà utilizzare come esempi le esercitazioni svolte durante il corso (consultare la pagina del corso sul portale e-learning).
Per la fase successiva della prova orale, valgono le stesse indicazioni fornite per le prove svolte in presenza.

Pagina web del corso
https://elearn.ing.unipi.it/enrol/index.php?id=1993

Ultimo aggiornamento 15/12/2020 15:22