

## SYLLABUS – L30

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	<b>Analisi Numerica</b>
Corso di studio	<i>Scienza e tecnologia dei materiali L30</i>
Anno di corso	<i>Secondo</i>
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	: 7
SSD	<i>MAT08-INF01</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiano</i>
Periodo di erogazione	<i>I semestre</i>
Obbligo di frequenza	<i>Per la parte di Laboratorio</i>
Docente	
Nome e cognome	Cinzia Elia
Indirizzo mail	<a href="mailto:cinzia.elia@uniba.it">cinzia.elia@uniba.it</a>
Telefono	+39 0805442685
Sede	<i>Dipartimento di Matematica, Università di Bari Aldo Moro, via Edoardo Orabona, 4, Bari (Italy)</i>
Sede virtuale	<i>Solo in caso di necessità verrà utilizzata la piattaforma Microsoft Teams</i>
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	
Syllabus	
<b>Obiettivi formativi</b>	<p>Conoscenza e comprensione</p> <p>Studio teorico e numerico di tecniche e algoritmi per la simulazione di modelli reali quali oscillatori meccanici, chimici ed elettrici. Lo studente impara: i) a risolvere numericamente equazioni differenziali non lineari e ad interpretarne il risultato nel contesto del modello di partenza; ii) ad approssimare dati sperimentali in maniera stabile con regressione lineare, multi-lineare, polinomiale.</p>
<b>Prerequisiti</b>	<p><i>Geometria analitica</i> (piano cartesiano e luoghi geometrici: rette e coniche).</p> <p><i>Analisi Matematica</i> (funzioni, successioni).</p> <p><i>Algebra lineare</i> (matrici, vettori, spazi vettoriali, sottospazi, lineare indipendenza, base di spazio vettoriale).</p> <p><i>Matlab</i> (conoscenza delle istruzioni base del Matlab, utilizzo del Matlab come ambiente di lavoro).</p>
<b>Contenuti di insegnamento (Programma)</b>	<p><b>Teoria</b></p> <p><u>Algebra lineare e sistemi lineari.</u></p> <p>Richiami di algebra lineare dal programma di Analisi Matematica 2</p> <p>Aspetti numerici: Matrici bene e mal condizionate. Risoluzione numerica di sistemi lineari. Costo computazionale della regola di Cramer e <u>necessità</u> di algoritmi meno costosi per il calcolo numerico delle soluzioni dei sistemi lineari. Sistemi lineari con matrice dei coefficienti triangolare. Algoritmo di sostituzione in avanti e all'indietro. Eliminazione di Gauss e fattorizzazione LU. Instabilità numerica dell'algoritmo LU e algoritmo LU con pivot.</p> <p><u>Trattamento dei dati</u></p> <p>Retta di regressione lineare. Retta di regressione lineare per modelli di tipo esponenziale. Coefficiente di correlazione, coefficiente di determinazione e rappresentazione del vettore dei residui come verifiche della bontà del modello. Equazioni normali. Regressione multilineare. Minimi quadrati polinomiali.</p>

## SYLLABUS – L30

Malcondizionamento della matrice  $A^TA$  per problemi di grado più elevato.

Applicazioni: Calcolo dei coefficienti delle reazioni chimiche attraverso relazioni lineari, esponenziali e multilineare (acetilene, cloro disciolto in acqua). Calcolo dell'esponente nell'equazione di Hall Patch a partire da dati sperimentali. Calcolo dei coefficienti per il moto di una palla di baseball a partire da dati sperimentali.

### Zeri di funzione.

Metodo delle bisezioni. Descrizione e teorema di convergenza con dimostrazione. Ricerca grafica dell'intervallo  $[a, b]$  che contiene lo zero di una funzione. Determinazione a priori del numero di iterate necessarie per approssimare lo zero con  $k$  cifre significative. Metodo di Newton. Descrizione e interpretazione geometrica e analitica. Concetto fondamentale della velocità di convergenza del metodo. Iterazioni di punto fisso. Definizione delle iterazioni, interpretazione geometrica. Teorema sulla esistenza e unicità del punto fisso con dimostrazione. Metodo delle secanti.

Applicazioni: Concentrazione di una sostanza con decadimento esponenziale e equazione di Van Der Waals di stato di un gas. Ricerca di punti di intersezione tra due funzioni. Ricerca dei punti di equilibrio in reazioni chimiche.

### Risoluzione di ODEs

Metodo di Eulero Esplicito. Errore locale ed errore globale.

Convergenza della soluzione numerica a quella teorica.

Comportamento qualitativo: stabilità lineare del metodo; problema test. Oscillatore armonico. Comportamento qualitativo del metodo di Eulero esplicito. Eulero semplificato per la risoluzione di problemi Hamiltoniani.

Applicazioni: oscillatori lineari e non provenienti da sistemi meccanici e circuiti elettrici e oscillatori chimici: 1) oscillatore armonico con frequenza naturale 1,2,3; 2) oscillatore armonico con attrito; 3) oscillatore armonico con forza esterna periodica in risonanza e non; 4) oscillatore armonico con attrito e forza esterna periodica; 5) oscillatore non lineare di Duffing; 6) Brusselator come modello di reazione chimica autocatalitica; 7) Oscillatore non lineare di Van Der Pol. Oscillatori meccanici ed elettrici accoppiati o in rete.

### Laboratorio

#### Istruzioni di base

Matlab come ambiente di lavoro. Uso di variabili. Funzioni predefinite del Matlab. Grafico di funzioni in una e due variabili. Rappresentazione di superfici. Rappresentazione di curve nel piano attraverso le equazioni parametriche.

Vettori e matrici: inserimento manuale o tramite funzioni predefinite (ones, eye, rand, randn). Uso del semicolon. Manipolazione di righe o colonne. Estrazione di sottomatrici. Uso del comando help per utilizzare le funzioni predefinite del Matlab in autonomia.

Ciclo for. Calcolo della media delle componenti di un vettore. Creazione di function media. Test della function tramite problema test.

Istruzione if. Introduzione del metodo Montecarlo. Applicazione all'approssimazione di  $\pi$  greco e al calcolo di integrali di funzione. Istogramma per verifica della distribuzione normale della media campionaria.

## SYLLABUS – L30

	<p><u>Algebra lineare e sistemi lineari.</u> Algoritmo di sostituzione in avanti. Algoritmo di sostituzione all'indietro. Uso della function predefinita del Matlab lu insieme a sostituzione in avanti e all'indietro per la risoluzione di un sistema lineare. Matrici malcondizionate. Esempi teorici e numerici. Test di malcondizionamento tramite risoluzione di sistemi lineari con vettore dei termini noti perturbato.</p> <p><u>Statistica.</u> Esperimenti numerici per i seguenti argomenti: Retta di regressione lineare. Regressione lineare per modelli di tipo esponenziale. Calcolo del coefficiente di correlazione, del coefficiente di determinazione e rappresentazione del vettore dei residui come verifiche della bontà del modello. Risoluzione delle equazioni normali. Regressione multilineare. Minimi quadrati polinomiali. Estrazione di dati da un file Excel. Applicazioni: reazioni chimiche (acetylene, chlorine), equazioni di Hall-Petch, moto di una palla.</p> <p><u>Zeri di funzione.</u> Function bisezioni, Newton e secanti. Ricerca dell'intervallo del metodo delle bisezioni e del punto di partenza della successione di Newton a partire dal grafico della funzione. Condizionamento del problema. Confronti tra le velocità di convergenza dei tre metodi. Simulazioni numeriche per tutti i problemi applicativi elencati nella sezione di Teoria.</p> <p><u>Metodi numerici per la risoluzione di ODEs.</u> Function metodo Eulero Esplicito. Verifica dell'ordine di convergenza di Eulero Esplicito. Esperimenti sulla stabilità lineare del metodo. Comportamento qualitativo delle soluzioni numeriche per l'oscillatore armonico con e senza attrito e forzante. Function Eulero implicito. Function predefinita del Matlab ODE45. Simulazioni di tutte le applicazioni indicate nella parte teorica.</p>
<b>Testi di riferimento</b>	<p>1. Introduzione al Calcolo Scientifico-Metodi e Applicazioni con Matlab, Giovanni Naldi, Lorenzo Pareschi e Giovanni Russo, Mcgraw-Hill.</p> <p>2. Introduzione al Calcolo Scientifico, Quarteroni e Saleri, Springer.</p>
<b>Note ai testi di riferimento</b>	<i>Solo alcuni capitoli.</i>

<b>Organizzazione della didattica</b>			
<b>Ore</b>			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
175	32	45	98
<b>CFU/ETCS</b>			
7	4	3	

<b>Metodi didattici</b>	
	Lezioni frontali e simulazioni al computer in aula.

<b>Risultati di apprendimento previsti</b>	
<b>Conoscenza e capacità di comprensione</b>	Conoscenza teorica e pratica di tecniche numeriche necessarie alla risoluzione di problemi e modelli la cui soluzione analitica non è nota oppure richiede tempi lunghi.

## SYLLABUS – L30

	<p>Comprensione dei concetti di problema ben condizionato e di algoritmo stabile per la risoluzione dello stesso. Entrambi i concetti sono essenziali per la simulazione numerica accurata di modelli reali.</p> <p>Conoscenza di elementi di base di programmazione.</p>
<b>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Capacità di simulare soluzioni di modelli non lineari di equazioni differenziali ordinarie riconoscendo il metodo numerico più adatto alla simulazione.</li> <li>• Capacità di accertarsi che la soluzione numerica ottenuta sia coerente con il comportamento atteso dal modello reale di partenza.</li> <li>• Capacità di riconoscere problemi ben condizionati, cioè problemi per i quali una soluzione approssimata resti comunque vicina alla soluzione teorica.</li> </ul>
<b>Competenze trasversali</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Autonomia di giudizio</b> Capacità di riconoscere problemi che possano essere risolti numericamente in maniera stabile (con soluzioni approssimate vicine a quelle teoriche). Capacità di verificare se la soluzione numerica ottenuta è coerente con il modello di partenza e può essere quindi accettata come simulazione del fenomeno reale.</li> <li>• <b>Abilità comunicative</b> Abilità nel presentare un problema reale e nel saper giustificare il modello scelto per rappresentarlo. Abilità nel descrivere le tecniche adeguate alla risoluzione del modello. Abilità nell'illustrare la simulazione di un modello di partenza e nel giustificare la coerenza. Le precedenti abilità sono indispensabili per instaurare un'efficace collaborazione a livello di squadra.</li> <li>• <b>Capacità di apprendere in modo autonomo</b> Capacità di simulare modelli nuovi, non necessariamente affrontati durante il corso. Capacità di studiare in maniera autonoma tecniche numeriche alternative ed efficaci alla simulazione del modello di partenza.</li> </ul>

<b>Valutazione</b>	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<p>Parte pratica al computer per l'esecuzione di un programma Matlab come meglio specificato alla voce sottostante "Criteri di valutazione".</p> <p>Solo al superamento della parte pratica ci sarà la prova orale per la verifica delle conoscenze teoriche.</p>
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Conoscenza e capacità di comprensione:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Livello minimo: riconoscere la procedura idonea allo studio e alla risoluzione di un problema (es.: regressione e che tipo di regressione, risoluzione di un'equazione differenziale, ricerca dei punti di equilibrio di un sistema o dei punti di minimo di una funzione, ecc.);</li> <li>○ Livello intermedio: descrivere la simulazione ottenuta nell'ambito del problema di partenza;</li> <li>○ Livello superiore: fornire giustificazione teorica delle scelte fatte.</li> </ul> </li> <li>• <b>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Livello minimo per il superamento dell'esame: riconoscere la tecnica numerica adatta alla risoluzione di un dato problema.</li> <li>○ Livello intermedio: risolvere in maniera stabile e coerente il problema di partenza;</li> <li>○ Livello superiore: sviluppare in maniera autonoma un programma per la</li> </ul> </li> </ul>

## SYLLABUS – L30

	<p>soluzione del problema.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Capacità di affrontare e risolvere problemi simili a quelli studiati per il corso ma che richiedono di adeguare le procedure di risoluzione studiate;</li> </ul> </li> <li>• <i>Abilità comunicative:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Per tutti i livelli: capacità di esporre in maniera chiara il problema di partenza, la tecnica scelta per risolverlo, la simulazione ottenuta.</li> </ul> </li> <li>• <i>Capacità di apprendere:</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Capacità di estendere le tecniche studiate alla risoluzione di problemi non affrontati a lezione;</li> <li>○ Capacità di comprendere ed eseguire tecniche numeriche nuove anche tramite l'uso di function predefinite del Matlab.</li> </ul> </li> </ul>
<p>Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p>Da 18 a 26: Questo è il voto minimo che si ottiene se si supera la parte pratica, al calcolatore. E' necessario comprendere i passaggi necessari per la risoluzione di un dato problema, la <u>semplice ripetizione di istruzioni, se non accompagnata dalla consapevolezza dei processi alla base delle istruzioni stesse, non è sufficiente al superamento dell'esame.</u></p> <p>Da 27 a 30: E' necessario fornire giustificazione teorica del lavoro svolto.</p>
<p><b>Altro</b></p>	