

Programma del Corso

"Calcolo Numerico" (C.L. Chimica v.o.)

A.A. 2001-2002

I . Nozioni Introduttive.

Rappresentazione dei numeri. Errori e loro propagazione. Condizionamento di un problema; stabilità degli algoritmi.

II . Richiami su matrici e spazi vettoriali

Matrici: definizioni e proprietà fondamentali. Matrici speciali (simmetriche, definite positive, ecc.) Matrici di rotazione. Definizioni e prime proprietà di autovalori ed autovettori. Spazi vettoriali. Norme di vettori, norme di matrici. Teorema del punto unito.

III . Soluzione di equazioni e sistemi di equazioni non lineari

Separazione e approssimazione della radici con metodi iterativi. Ordine di convergenza ed efficienza dei procedimenti iterativi. Metodo di bipartizione. Metodo iterativi a un punto. Metodo di Newton- Raphson; metodo delle secanti. Criteri d'arresto. Radici multiple.

Metodi iterativi per sistemi di equazioni non lineari. Metodo di Newton per sistemi.

IV . Sistemi lineari

Generalità, condizionamento. Metodi iterativi: di Jacobi, di Gauss-Seidel, di rilassamento (S.O.R), struttura dei metodi e loro convergenza. Velocità asintotica di convergenza. Criteri d'arresto. Metodi diretti: di Gauss, di Gauss-Jordan, di fattorizzazione LU; algoritmo di Thomas per sistemi tridiagonali.

Calcolo dell'inversa, del rango e del determinante di una matrice.

V . Autovalori di matrici

Proprietà fondamentali di autovalori ed autovettori per matrici generali e per matrici speciali. Matrici diagonalizzabili. Molteplicità algebrica e geometrica. Localizzazione degli autovalori, teoremi di Gershgorin. Metodo delle potenze, metodo delle potenze inverse.

VI . Approssimazione di dati e funzioni

L'interpolazione polinomiale; generalità; errore di troncamento, errore propagato, costante di Lebesgue. Espressione di Lagrange del polinomio interpolatore. Espressione del polinomio interpolatore e dell'errore di troncamento alle differenze divise. Formula di Newton alle differenze finite in avanti.

Convergenza dei polinomi interpolatori, nodi di Chebyshev.

Concetto di interpolazione mediante funzioni spline. Espressione e convergenza delle spline cubiche interpolanti. Derivazione numerica (formule "in avanti" per la derivata prima, formula "in avanti" del primo ordine per una derivata di ordine qualunque, formule centrate).

VII . Integrazione numerica

Formule di quadratura interpolatorie: concetti base, grado di precisione. Formule di Newton - Cotes chiuse ed aperte semplici e generalizzate. Estrapolazione di Richardson, metodo di Romberg

VIII . Equazione alle differenze

Definizioni e proprietà base; soluzione delle equazioni alle differenze lineari a coefficienti costanti.

(LG) Cap. 8

IX . Soluzione numerica di equazioni differenziali ordinarie

Soluzione numerica del problema di Cauchy, definizioni e concetti base. Errore di troncamento locale, errore globale. Consistenza, stabilità, convergenza dei metodi.

Metodi one-step: di Eulero-Cauchy, di Heun, di Runge-Kutta del 4° ordine. Convergenza.

Metodi multi-step espliciti: del punto centrale, di Adams-Bashfort, consistenza e convergenza dei metodi multistep espliciti.

Metodi di predizione-correzione: di Eulero modificato, di Adams-Moulton, di Milne.

Zero stabilità. Stabilità assoluta.

Soluzione numerica di sistemi di equazioni differenziali.

X . Soluzione numerica di problemi alle derivate parziali

Generalità sulle equazioni alle derivate parziali. Classificazione e linee caratteristiche per le equazioni quasi-lineari del primo e del secondo ordine. Schemi alle differenze finite per equazioni del primo ordine e del secondo ordine: generalità, errore di troncamento locale. Consistenza, stabilità, convergenza; criterio di Lax. Metodi espliciti ed impliciti per equazioni del primo ordine: upwind, leap-frog, di Crank-Nicolson; e relativa convergenza. Metodi espliciti e metodi impliciti per problemi ai limiti e/o al contorno per equazioni del 2° ordine iperboliche, paraboliche, ellittiche e relativa convergenza.

XI. Programmazione FORTRAN

Costanti e variabili, istruzioni dichiarative di tipo e di dimensione, istruzioni di: assegnazione, cicli DO e DO WHILE, GOTO, I/O formattate e non formattate con ripetizione di specifica e gruppi di specifiche. Strutture IF-THEN-ELSE. Funzioni di libreria. Sottoprogrammi: statement-function, function, subroutine.

I testi di riferimento sono i seguenti:

[LG] **L. Gori** - *Calcolo Numerico* (IV Ediz.) Ed. Kappa- Roma - 1999.

[LG1] **L. Gori** - *Soluzione numerica di problemi alle derivate parziali. Metodi alle differenze.*
Dispense A.A. 1999-2000.

[GLC] **L. Gori- M.L. Lo Cascio** - *Esercizi di Calcolo Numerico* (II Ed.) Ed. Kappa- Roma - 1999.

[GP] **G. Pesamosca** - *FORTRAN 77*. Ed. Kappa - Roma 1996.

Per gli argomenti svolti, i riferimenti ai testi sono i seguenti:

Arg.I [LG], Cap.1.

Arg II, [LG], Cap. 2 - *Si possono omettere: §2.6- Matrici di Householder (in § 2.7)- dim.Teorema 2.10.2.*

Arg III [LG], Cap. 3 - *Si possono omettere: § 3.11- § 3.12- § 3.13.*

Arg IV [LG], Cap. 4 - *Si possono omettere: § 4.7 - § 4.11 - § 4.13 - § 4.14.*

Arg. V [LG], Cap. 5. *Si possono omettere: dim. Teor.5.3.1- Teorema 5.3.2- § 5.9- § 5.10- § 5.11- § 5.12- § 5.14.*

Arg. VI [LG], Cap. 6. *Si possono omettere: § 6.8, § 6.9, § 6.12, § 6.13, § 6.14, § 6.15.*

Arg. VII [LG], Cap. 7. *Si possono omettere: § 7.6, § 7.7, § 7.8, § 7.9, § 7.11.*

Arg. VIII [LG], Cap. 8

Arg IX [LG], Cap. 9. *Si possono omettere: § 9.12, § 9.13.*

Arg. X [LG1].

Arg. XI [GP], Cap. 1, Cap. 2 (*si possono omettere: §2.3.4, §2.3.6, §2.3.7, §2.5.3, §2.6.2, §2.6.5, §2.6.6*),
Cap. III: §3.1 - §3.6 (*si possono omettere: §3.4.2, §3.4.3, §3.4.5*), Cap IV (*si possono omettere: §4.5.4, §4.5.5*).