CALCOLO SCIENTIFICO

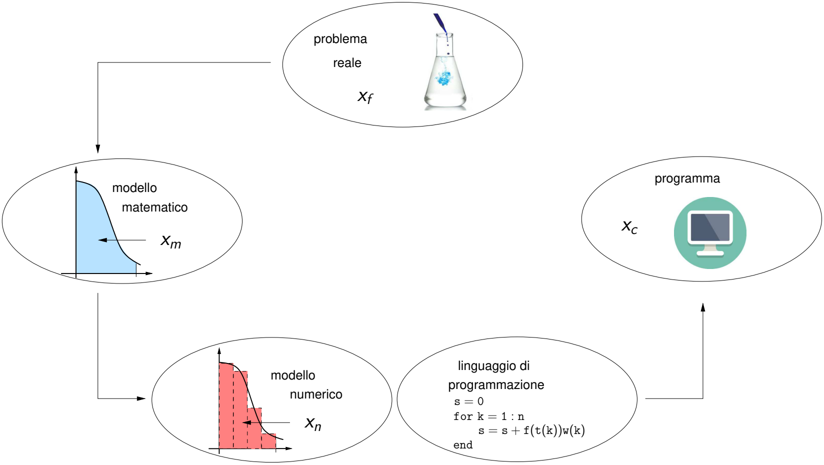
A.A. 2021/22

Paola Gervasio

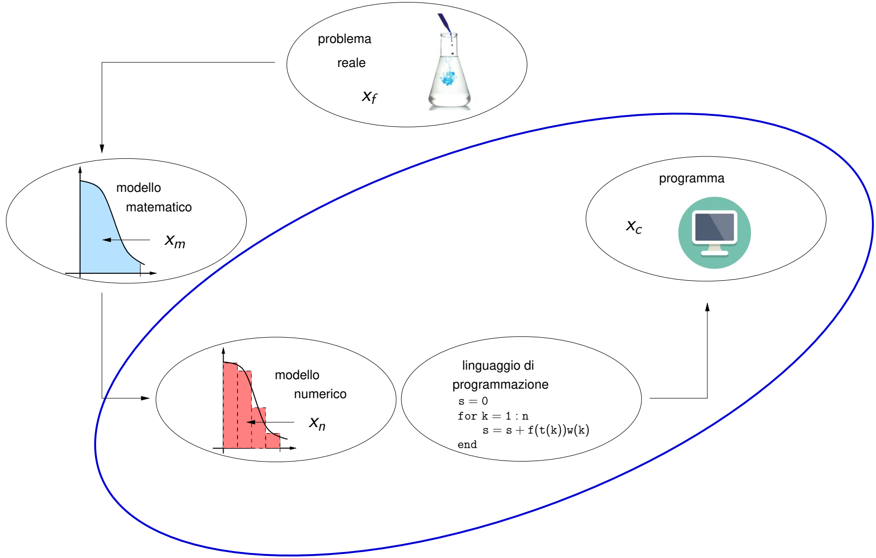
e-mail: paola.gervasio@unibs.it

web: https://paola-gervasio.unibs.it

Dal problema reale alla soluzione computazionale

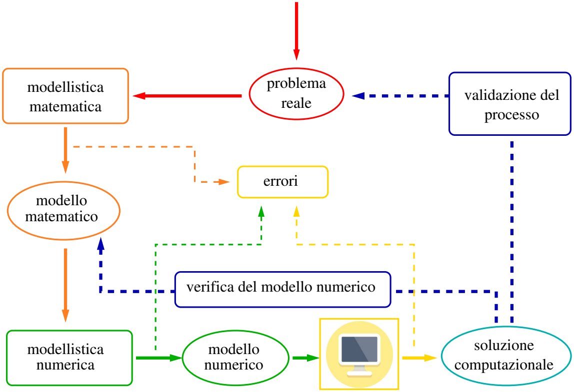


Il calcolo scientifico



Il **Calcolo Scientifico** è quella disciplina che, partendo dal modello matematico,

- formula un modello numerico,
- propone metodi efficienti per calcolare la soluzione computazionale ed infine
- verifica la correttezza e l'accuratezza del modello numerico e valida il processo confrontando i risultati ottenuti al computer con i dati sperimentali.



Abbiamo bisogno di:

– matematica
– calcolatori

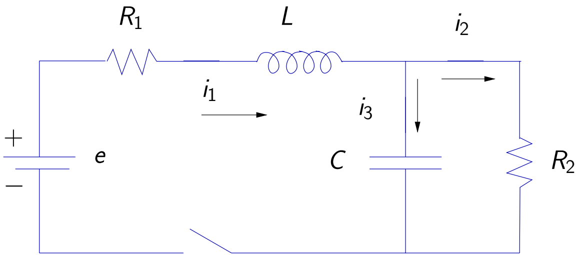
Dobbiamo tenere sotto controllo:

– gli errori
– i costi computazionali

Dal problema ($\rightarrow$ cs $\rightarrow$) alla soluzione

(cs = calcolo scientifico)

1. problema reale: Si vuole approssimare l'andamento della differenza di potenziale $v(t)$ ai capi del condensatore C a partire dal tempo $t = 0$ in cui viene chiuso il circuito e fino al raggiungimento dello stato stazionario.



Dati: R_1, R_2 resistenze costanti, L induttanza costante, e f.e.m, C capacità costante

Incognita: $v(t)$ = differenza di pontenziale ai capi del condensatore.

Dal problema (→ cs →) alla soluzione

2. modello matematico:

Applicando la legge di Ohm $\Delta V = iR$, le leggi di Kirchoff, la relazione $i = C\frac{dv}{dt}$ per il condensatore, la legge $\Delta V = L\frac{di}{dt}$ per l'induttanza, otteniamo il sistema

$$\begin{cases} \dfrac{di_1}{dt} = \dfrac{1}{L}(e - i_1 R_1 - v) \\ \dfrac{dv}{dt} = \dfrac{1}{C}\left(i_1 - \dfrac{v}{R_2}\right) \\ i_1(0) = 0, v(0) = 0 \end{cases}$$

Ponendo $\left[\begin{array}{c} x_1(t) = i_1(t) \\ x_2(t) = v(t) \end{array}\right]$, il sistema diventa

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = A\mathbf{x} + \mathbf{b}u \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{0} \\ y = x_2 \end{cases}$$

Si parla di problema nel continuo, soluzione esatta

Dal problema (→ cs →) alla soluzione

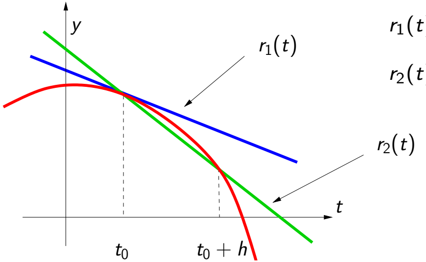
3. modello numerico (o discreto)

ogni passaggio al limite (e quindi ogni derivata) deve essere approssimata, discretizzata.

ad esempio:

approssimare $\frac{dv}{dt}(t_0)$ con un rapporto incrementale vuol dire

$$\frac{dv}{dt}(t_0) \simeq \frac{v(t_0+h)-v(t_0)}{h}$$



$r_1(t) = m_1 t + q_1$ con $m_1 = \frac{\partial v}{\partial t}(t_0)$,

$r_2(t) = m_2 t + q_2$ con $m_2 = \frac{v(t_0+h)-v(t_0)}{h}$

Si parla di problema discreto, soluzione discreta

Dal problema (→ cs →) alla soluzione

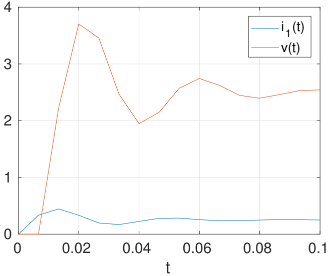
4. implementazione al calcolatore

Dobbiamo scrivere un programma per la risoluzione numerica del nostro problema discreto, ad esempio con Matlab:

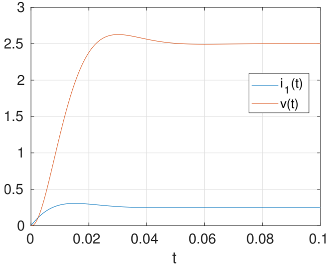
```
R1=10; R2=10; e=5; L=0.1; C=1.e-3;
A=[-R1/L -1/L; 1/C -1/(R2*C)]; bu=[e/L; 0];
f=@(t,x)A*x+bu;
tspan=[0,0.1]; x0=[0;0]; Nh=200; h=diff(tspan)/Nh;
tn=linspace(tspan(1),tspan(2),Nh+1);
un=zeros(Nh+1,2);
for n=1:Nh
    wn=un(n,:).';
    w=wn+h*f(tn(n),wn);
    un(n+1,:)=w.';
end
plot(tn,un(:,1),tn,un(:,2)); grid on
legend('i_1(t)','v(t)'); xlabel('t')
set(gca,'Fontsize',16)
```

Dal problema ($\rightarrow$ cs $\rightarrow$) alla soluzione

5. interpretazione dei risultati sia grafici che numerici.



$h = 1/160$

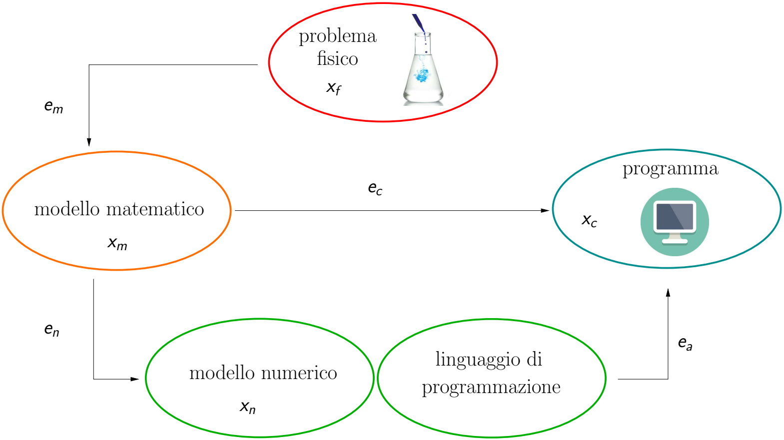


$h = 1/1000$

La soluzione numerica ottenuta è soddisfacente? Chi mi garantisce che sia una buona approssimazione di quella esatta?

Stima a priori sui dati: l'errore tra la soluzione esatta e quella numerica tende a zero quando $h \rightarrow 0$.

Gli inevitabili errori

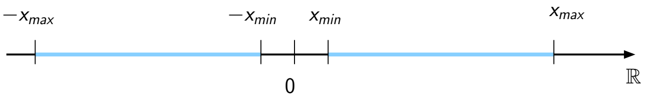


e_m=errore di modello, e_n=errore numerico,
e_a=errore di arrotondamento, e_c=errore computazionale
$(e_c = e_n + e_a)$,

L'artimetica di macchina

Su un calcolatore non si possono rappresentare tutti i numeri reali, ma solo quelli con un numero finito di cifre decimali, compresi nell'insieme

$$[-x_{max}, -x_{min}] \cup \{0\} \cup [x_{min}, x_{max}]$$



In Matlab: $x_{min} = 2.2251 \cdot 10^{-308}$, $x_{max} = 1.7977 \cdot 10^{308}$.
I comandi matlab sono: `realmin` e `realmax`
Matlab usa base $\beta = 2$ e 8 Bytes per memorizzare un numero macchina.

Errori di arrotondamento

Nel rappresentare un numero in macchina si commette un errore (rounding error) che dipende dalla base (β) di rappresentazione usata e dal numero t di bit utilizzati per memorizzare la mantissa del numero:

$$|x - fl_t(x)| \leq \frac{1}{2}\beta^{1-t}|x|$$

In Matlab $\beta = 2$ e $t = 53$,

$$\frac{1}{2}\beta^{1-t} = 1.1102 \cdot 10^{-16}$$

Una formula ricorsiva inefficiente

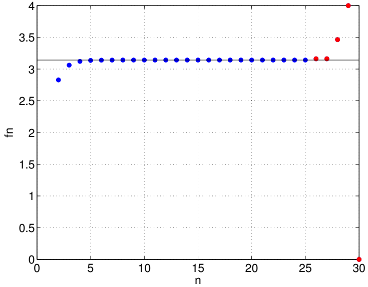
$$\begin{cases} f_2 = 2 \\ f_{n+1} = 2^{n-0.5}\sqrt{1-\sqrt{1-4^{1-n}f_n^2}}, \quad n = 2, 3, ... \end{cases}$$

Si riesce a dimostrare che $\lim_{n\to\infty} f_n = \pi$, quindi i valori f_n sono della approssimazioni di π, tanto più accurate quanto più n è alto.

Una formula ricorsiva inefficiente

$$\begin{cases} f_2 = 2 \\ f_{n+1} = 2^{n-0.5}\sqrt{1-\sqrt{1-4^{1-n}f_n^2}}, \quad n = 2, 3, \ldots. \end{cases}$$

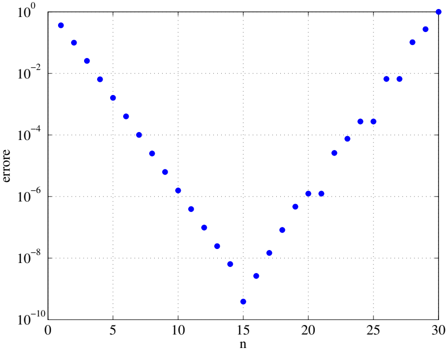
Si riesce a dimostrare che $\lim_{n\to\infty} f_n = \pi$, quindi i valori f_n sono della approssimazioni di π, tanto più accurate quanto più n è alto.
Se scriviamo un programmino e lo lanciamo, otteniamo:



I risultati numerici

Misuro l'errore (relativo) tra π e la sua approssimazione f_n, mi aspetto che l'errore vada a zero quando $n \to \infty$.

errore$= \frac{|f_n - \pi|}{\pi}$



L'errore scende fino ad un certo punto (per $n = 15$) e poi ricomincia a salire.

La ricetta fornita dalla teoria NON funziona in pratica, a causa della propagazione degli errori di arrotondamento.

Un altro tipo di (in)efficienza

Risolvere un sistema lineare di 24 equazioni in 24 incognite con il metodo di Cramer richiede circa

$$3 \cdot 25! \sim 4.65 \cdot 10^{25} \text{ operazioni elementari } (+, -, \times, /)$$

Il calcolatore più veloce al mondo (June 2020):

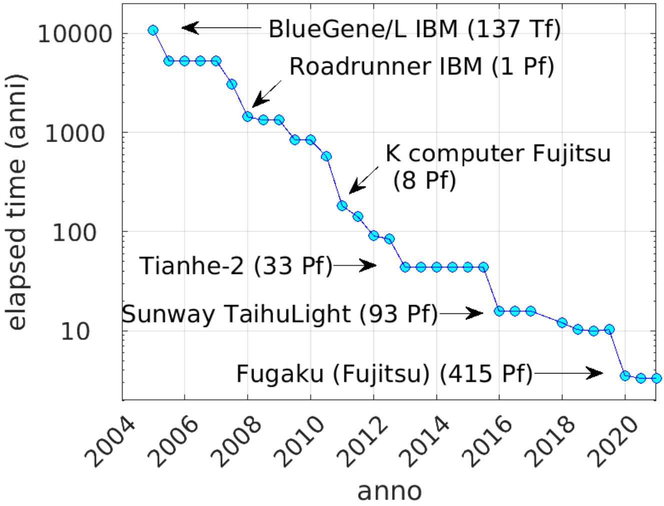
Supercomputer Fugaku , Fujitsu (RIKEN Center for Computational Science, Japan),
7 299 072 computing cores,
velocità massima: 422.01 Peta-flops $= 422.01 \times 10^{15}$ flops

Sul Supercomputer Fugaku: $4.65 \cdot 10^{25}$flops $\simeq 10^8$ sec $\simeq$ 3.3 anni

flops=FLoating point Operations Per Second

... e dal 2005 ad oggi

per risolvere un sistema lineare di 24 equazioni in 24 incognite con il metodo di Cramer sul calcolatore più veloce al mondo:



1Tf$= 10^{12}$ flops
1Pf$= 10^{15}$ flops

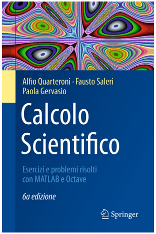
Servono metodi numerici più veloci, alternativi ai metodi classici che si usano con carta e penna.

Per fortuna, con i metodi numerici attuali, un sistema lineare 24×24 si risolve in un tempo trascurabile (molto meno di un secondo) su un PC da tavolo (2.66 GHz, $\simeq$ 42 GFlops)

Contenuti del corso CALCOLO SCIENTIFICO (6CFU)

1. Istruzioni fondamentali di Matlab
2. Propagazione di errori di arrotondamento
3. Risoluzione di equazioni non lineari
4. Risoluzione di sistemi lineari di grandi dimensioni
5. Approssimazione di funzioni e dati
6. Integrazione e derivazione numerica
7. Approssimazione di equazioni differenziali ordinarie

Informazioni sul corso



Testo di riferimento:
A. Quarteroni, F. Saleri, P. Gervasio.
Calcolo Scientifico,
6a ed. Springer Italia, Milano, 2017.
http://www.springer.com/it/book/9788847039520

Modalità d'esame: Unica prova scritto/pratica in laboratorio con esercizi e domande di teoria. Durante la prova in laboratorio NON sarà possibile portare materiale (libri, appunti o proprie matlab function), né consultare il materiale di lezione.
Si potranno usare le function matlab scritte durante le esercitazioni.