

CALCOLO NUMERICO

Corso di Laurea Triennale
in Ingegneria Chimica e dei Materiali

Canali A

Anno Accademico 2023-24

Docenti: Elena Bachini, Ludovico Bruni

29 febbraio 2024



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA



DIPARTIMENTO
MATEMATICA

DIPARTIMENTO DI MATEMATICA - TULLIO LEVI-CIVITA



- **DOCENTI**

- Elena Bachini elena.bachini@unipd.it
(ufficio IV piano Torre Archimede 4BC3 - 049 827 1324)
- Ludovico Bruni bruni@math.unipd.it
(ufficio V piano Torre Archimede 5BC1 - 049 827 1461)

- Tutor (in laboratorio)

- Matteo Zorzetto

Prendete il vostro **smartphone**, inquadrare il QR code e autenticatevi con **SSO** (credenziali di ateneo) o andate su **wooclap.com** e inserite il codice fornito sotto.



1

Vai a **wooclap.com**

2

Immettere il codice
dell'evento nel banner
superiore

Codice evento
NTXDOE



- ORARIO

	CANALE A
TEORIA – Aula 0B (Vallisneri)	<ul style="list-style-type: none">• Giovedì 8.30-10.30• Venerdì 8.30- 10.30
LABORATORIO- Aula Taliercio (nuova!)	<ul style="list-style-type: none">• Mercoledì 8.30-10.30

- RICEVIMENTO

Dopo lezione (in aula) o previo appuntamento via mail

NOTA: vi preghiamo di inserire **[CN icm]** nell'oggetto delle vostre email per identificarvi semplicemente



Contenuti:

1. Teoria del calcolo numerico
2. Fondamenti di programmazione in MATLAB

Cos'è il CALCOLO
NUMERICO?
Perché si studia?

Dall'Enciclopedia della Matematica TRECCANI (2013)

Da intendersi:

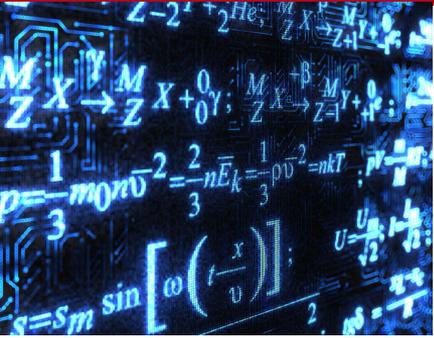
mediante un operatore
elettronico!

CALCOLO NUMERICO:

Parte dell'analisi matematica che si occupa della **ricerca di algoritmi per la risoluzione numerica** di problemi quali l'approssimazione di funzioni e l'integrazione di equazioni differenziali ordinarie o alle derivate parziali, **quando questi problemi non siano risolvibili per via analitica.**

GENERALITÀ

Il calcolo n. ha ricevuto un grande impulso grazie all'introduzione dei calcolatori, per cui uno dei suoi obiettivi è divenuto **la ricerca di algoritmi** (procedure deterministiche per risolvere date classi di problemi) **per ottenere, mediante un calcolatore, approssimazioni accurate nel minor tempo possibile.** (...) Nelle applicazioni moderne predominano la risoluzione di grossi sistemi di equazioni lineari (e, entro certi limiti, non lineari), l'approssimazione (...) di funzioni e mediante spline, problemi agli autovalori, problemi di ottimizzazione, equazioni differenziali ordinarie e alle derivate parziali. (...)



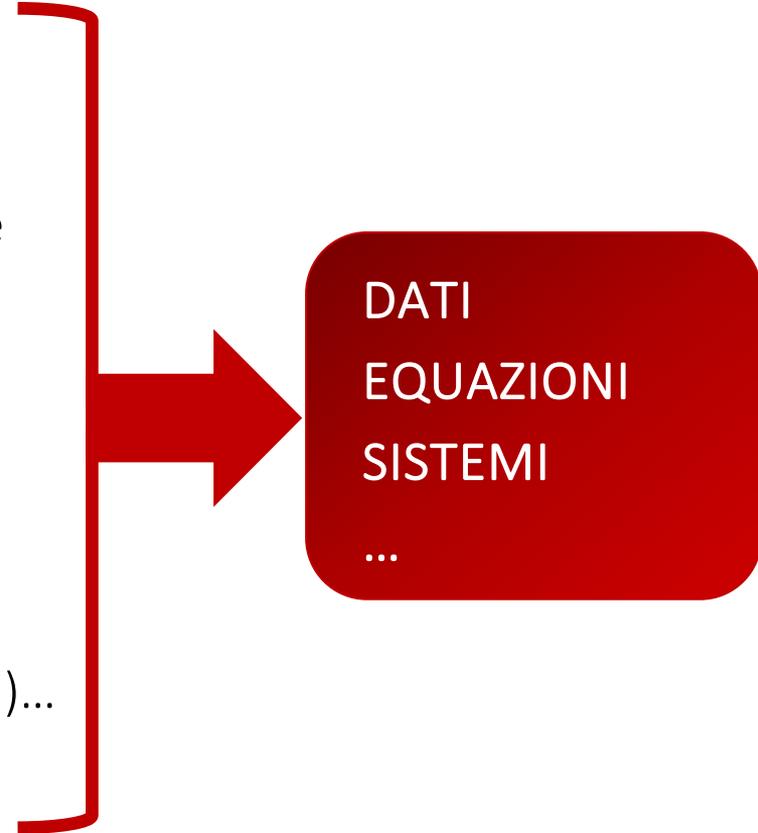
Studia gli strumenti matematici utilizzati dai **calcolatori elettronici** per trovare una **soluzione approssimata** ai problemi matematici che descrivono problemi fisici, ingegneristici, ...

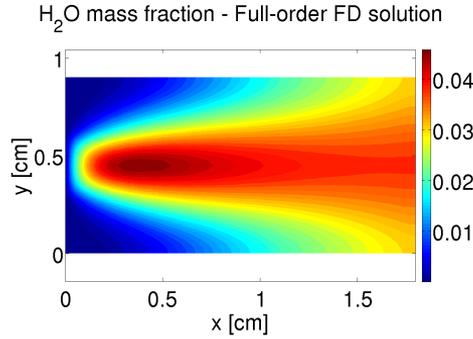
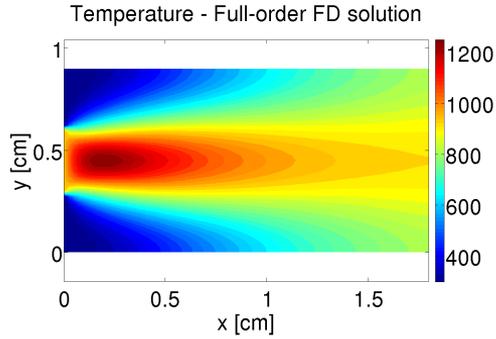




Ambiti di applicazione...infiniti

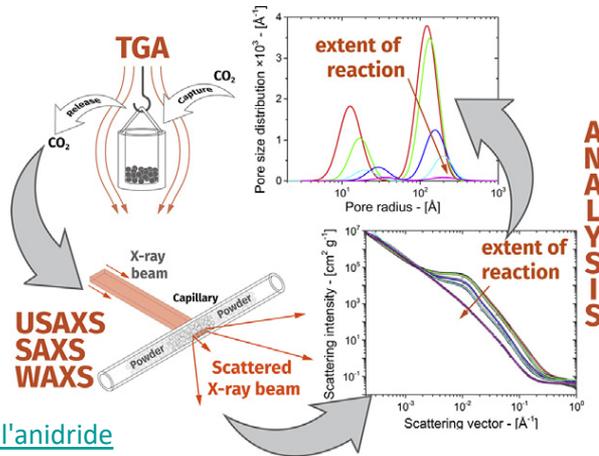
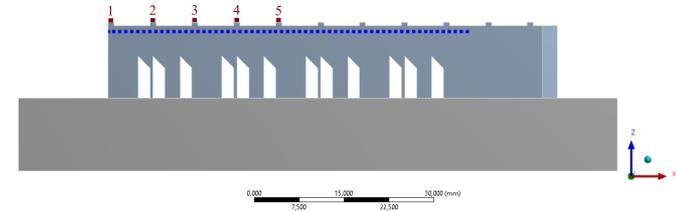
- Chimica
- Ottimizzazione dei processi
- Meccanica e dinamica dei solidi e delle strutture
- Meccanica e dinamica dei fluidi
- Geomeccanica
- Elettronica
-altre ingegnerie...
- Previsioni del tempo
- Data science e informatica (machine learning, AI)...
-





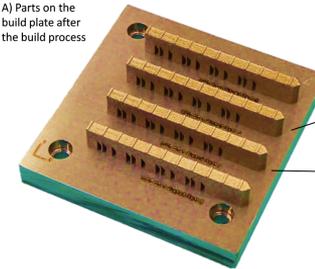
premixed H₂ - air flames
(Buffoni, Willcox 2010)

Powder Bed Fusion (PBF) of metals
(Chiappetta et. al. 2023)

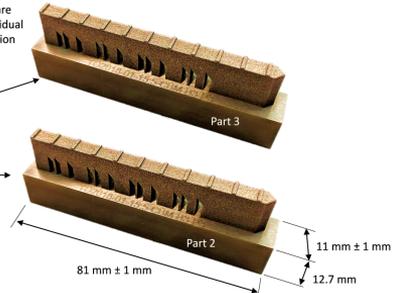


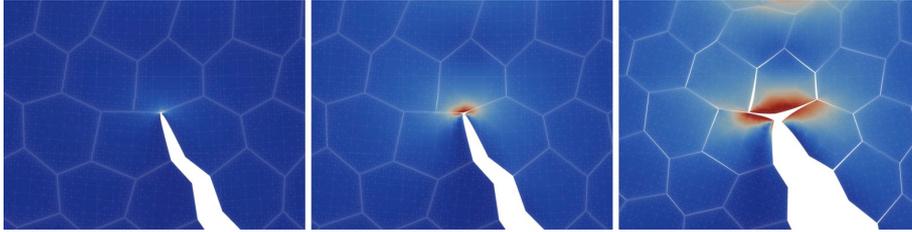
CaO based CO₂ sorbents
[“CO₂ - Cattura e utilizzo dell'anidride carbonica” group @UniPD](#)

A) Parts on the build plate after the build process

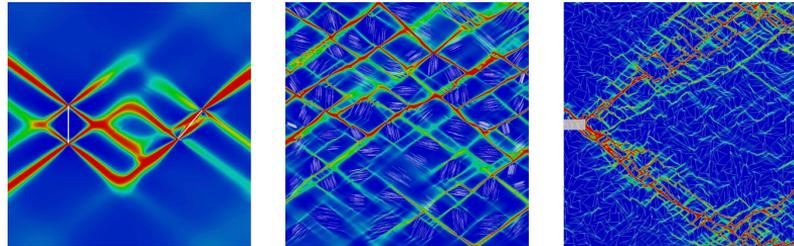


B) Parts 2 and 3 are separated for residual strain and distortion measurements





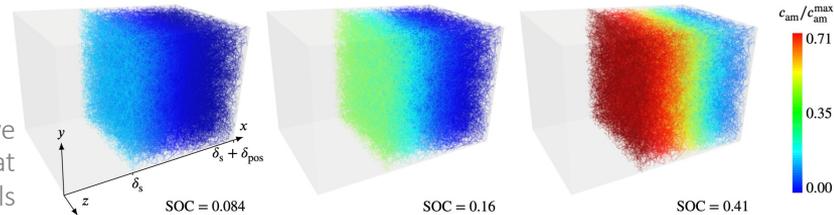
crack propagation in polycrystals

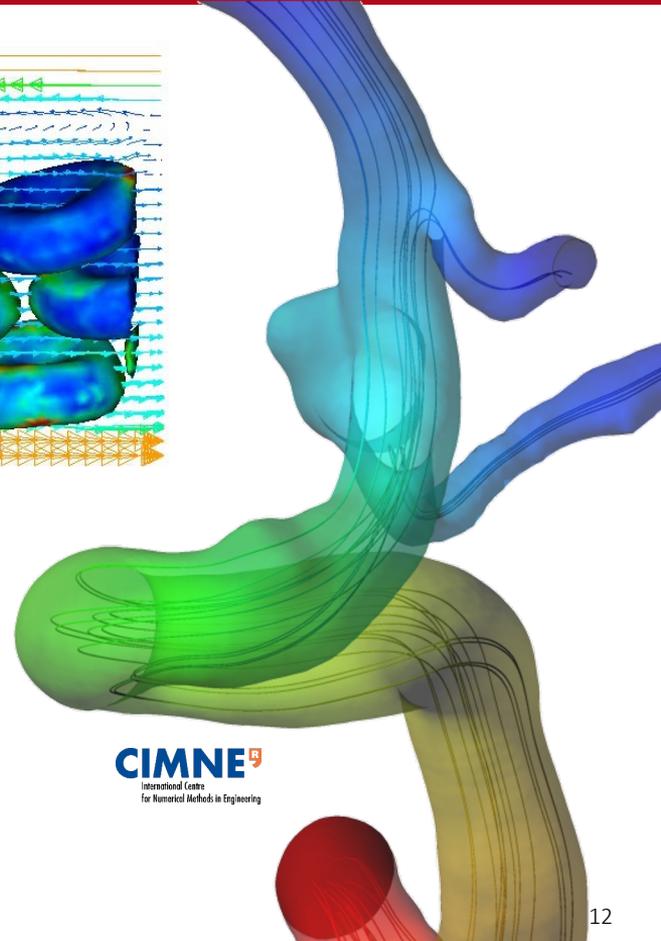
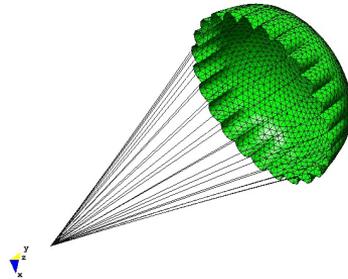
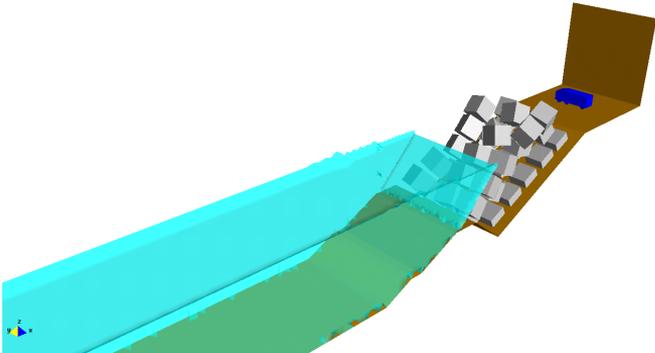
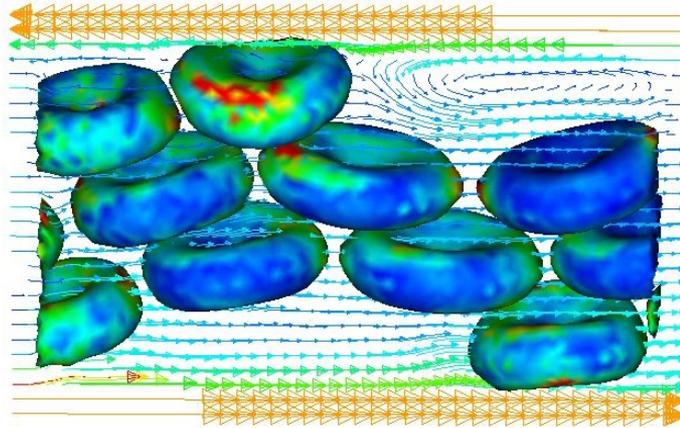
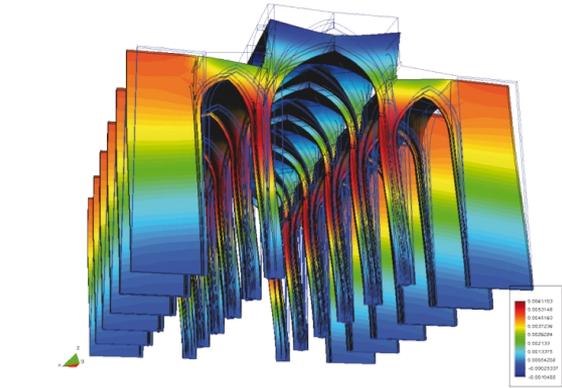


shear bands in a viscoplastic continuum with rigid line inclusions

COMS - Scienza dei materiali computazionale
[“Computational Materials Science” Group @ UniPD](#)

lithium concentration in the active fibers of a fibrous electrode at various state of charge levels





CIMNE[®]
International Centre
for Numerical Methods in Engineering



Ricerca al DII

Tematiche di ricerca - DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA INDUSTRIALE



In questo corso ci occuperemo degli aspetti di base che accomunano tutte queste applicazioni di calcolo numerico

- Quando scrivo un **numero** nel computer ed eseguo un **calcolo**, questo è esatto? Che errore commetto?
- Come posso interpolare o approssimare dei **dati** (sperimentali, misurati)?
- Come calcolo un **integrale** (continuo) al computer (discreto)? Che errore commetto?
- Come risolvo un' **equazione** non lineare al computer?
- Come risolvo un **sistema** di equazioni al computer?

Errori colossali dovuti a “bad numerics”!

Source <https://www-users.cse.umn.edu/~arnold/disasters/>

Missile Patriot - Dharan, in Arabia Saudita, il 25 febbraio 1991



Una batteria di missili Patriot americani a Dharan, in Arabia Saudita, non è riuscita a tracciare e intercettare un missile Scud iracheno in arrivo.

– 28 morti, 100 feriti

Causa: un errore legato all’aritmetica finita del computer per passare dal tempo misurato in decine di secondi al tempo misurato in secondi ($\times 1/10$).

Errore di 0.34s.....

Errori colossali dovuti a “bad numerics”!

Source <https://www-users.cse.umn.edu/~arnold/disasters/>



Esplosione del razzo Ariane 5 –

viaggio inaugurale Guyana francese, il 4 giugno 1996

- 500 milioni di euro (razzo più carico)
- Un numero floating point in 64 bit é stato convertito in un intero con segno in 16 bits. Il massimo intero con segno rappresentabile é 32767, ma il numero ottenuto era maggiore.... Overflow....

Errori colossali dovuti a “bad numerics”!

Source <https://www-users.cse.umn.edu/~arnold/disasters/>

Affondamento della piattaforma offshore Sleipner A nel Gandsfjorden, in Norvegia, il 23 agosto 1991 – perdita da 1 milione di dollari!

Errore nell' «uso» di un codice agli elementi finiti (NASTRAN)
Gli sforzi di taglio sono stati sottostimati del 47%





Le **interfacce grafiche** (Graphical User Interface - GUI) dei programmi commerciali sono facili, intuitive, user-friendly e

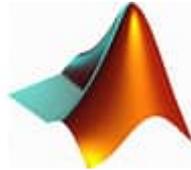
PERICOLOSISSIME (ma necessarie)

Non usate i programmi di calcolo alla cieca, anche una semplice interpolazione in excel potrebbe essere pericolosa!

Cercate sempre di pensare a cosa state facendo... cosa c'è dietro??

Nel 99% dei casi dovrete ricordare qualcosa di visto a calcolo numerico!

- Primi passi nella **programmazione**
- Fondamenti di MATLAB



```
30
31 % Parte esecutiva
32
33 % Stima del parametro ottimale e dell'intervallo
34 lmin = eigs(A,1,'sm');
35 lmax = eigs(A,1,'lm');
36 gammaopt = 2/(lmin+lmax);
37 gammamax = 2/lmax;
38
39 % Visualizzazione valori
40 fprintf('\n\n Intervallo per gamma ]0, %12.10g[ \n', gammamax);
41 fprintf(' gamma ottimale %15.10g \n\n', gammaopt);
42
43 % Inserimento valore alfa
44 gamma = input(' Inserisci il valore di gamma desiderato: ');
```



- Si alterneranno lezioni teoriche a lezioni pratiche di laboratorio
- **MOODLE** per la comunicazione docente studenti.
 - [Corso: IN18101050 - CALCOLO NUMERICO \(Canale A\) 2023-2024 | STEM \(unipd.it\)](#)
- Didattica integrativa **online** – (condivisa con il corso di Ing. Mecc.)
 - Orario da definire
 - Più informazioni verranno inserite su Moodle

1. **I numeri e il computer** (come scrive i numeri il computer? Che errori commettiamo con semplici operazioni aritmetiche $+, -, \times, :$)
2. **Equazioni non lineari** (come trovo la soluzione approssimata di equazioni non lineari?)
3. **Interpolazione e approssimazione** (come posso interpolare o approssimare dei dati? Che errore commetto?)
4. **Quadratura numerica** (come calcolo un integrale al computer?)
5. **Sistemi lineari** (come risolvo un sistema lineare? Se il sistema è di grandi dimensioni?)



per toccare con mano i temi trattati e vedere come “ragiona” il computer



Dalla sezione LABORATORIO su moodle

[Corso: IN18101050 - CALCOLO NUMERICO \(Canale A\) 2023-2024 | STEM \(unipd.it\)](#)

- 1. Iscrizione alle sessione di Laboratorio:** selezionare un gruppo per permettere ai tecnici la creazione dell'account
- 2. Corso MATLAB Onramp** (con consegna certificato su moodle)
- 3. Seguire le istruzioni in «ISTRUZIONI AULA TALIERCIO»**
 - Ritiro credenziali per l'account dei computer
 - Utilizzo cuffiette con cavo (jack 3.5mm)

IMPORTANTE: le credenziali e le cuffiette vanno portate a ogni lezione in laboratorio!



APPUNTI DELLE LEZIONI e SLIDE DEL LABORATORIO: fornite su moodle

LIBRI DI TESTO E ESERCIZIARI:

- REDIVO ZAGLIA, MICHELA. Calcolo Numerico: **Metodi ed Algoritmi**. Edizioni Libreria Progetto (ITA, PADOVA), 2007
- REDIVO ZAGLIA, MICHELA. Calcolo Numerico: **Esercizi**. Edizioni Libreria Progetto (ITA, PADOVA), 2009

Altri libri:

- Quarteroni, Alfio. Introduzione al calcolo scientifico esercizi e problemi risolti con MATLAB. Milano: Springer, 2006



Le date degli appelli d'esame ordinari sono le seguenti:

- I appello - **19 giugno 2024** - Aula Taliercio ore 8.30
- II appello - **5 luglio 2024** - Aula Taliercio ore 8.30
- III appello - **9 Settembre 2024** - Aula Taliercio ore 8.30
- IV appello - **TBD**

Si prevede un appello straordinario:

- **Pre-appello “frequentanti”** in orario di lezione (29 maggio 2024 DA CONFERMARE, h 8.30 – Aula Taliercio). **ACCESSO**: studenti che hanno dimostrato di aver seguito costantemente il lavoro svolto in aula e in laboratorio attraverso le consegne degli esercizi proposti



L'esame consiste in:

- Un **QUIZ DI ACCESSO** su moodle esami, della durata di **15 minuti** circa: domande a risposta multipla sui comandi di base di MATLAB

Chi non supera il quiz dovrà ripetere l'esame in uno degli appelli successivi

SOLO per chi supera il quiz:

- Una **PROVA SCRITTA (UNICA)** della durata di **3 ore** circa

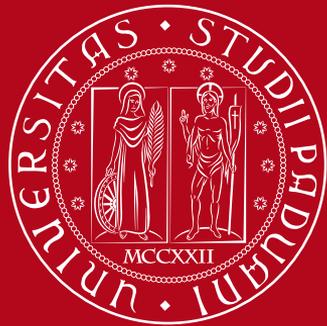
La prova si divide in

- **TEORIA:** esercizi/domande sugli argomenti del Corso (~ 2 ore)
- **LABORATORIO:** implementazione in MATLAB (~1ora)
- Una **prova orale** a discrezione dei docenti (da svolgersi in data da concordare)



- **NECESSARIO:** valutazione sufficiente sia nella teoria che nel laboratorio
- **VOTO FINALE:** una media ponderata tra il voto della teoria e del laboratorio

$$\mathbf{VOTO = 0.7x VOTO_TEORIA + 0.3x VOTO_LAB}$$



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

Benvenuti!
