

Programma del corso di Calcolo Scientifico (12 CFU)
A.A. 2009/2010
Prof. Daniela di Serafino

1. Argomenti trattati

Il problema dei minimi quadrati lineare

Il problema dei minimi quadrati lineare: formulazione, interpretazione geometrica, caratterizzazione delle soluzioni, equazioni normali e loro risoluzione mediante fattorizzazione di Cholesky e fattorizzazione QR. Esistenza della fattorizzazione QR. Relazione tra fattorizzazione QR e fattorizzazione di Cholesky per matrici a rango massimo. Trasformazioni ortogonali di Givens e di Householder, calcolo della fattorizzazione QR mediante tali trasformazioni. Calcolo della fattorizzazione QR mediante ortogonalizzazione di Gram-Schmidt. Complessità computazionale dei metodi suddetti.

Riferimenti bibliografici:

- Å. Björck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, 1996 (cap. 1: § 1.1, 1.3; cap. 2: § 2.2-2.4);
- M.T. Heat, *Scientific Computing. An Introductory Survey*, 2nd edition, McGraw-Hill, 2002 (cap. 3).

Accuratezza e stabilità di metodi diretti per la risoluzione di problemi di algebra lineare

Forward e backward error analysis. Studio dell'accuratezza e della stabilità della fattorizzazione LU (con e senza pivoting parziale), della fattorizzazione di Cholesky e della forward e back substitution, utilizzando la backward error analysis; analisi dell'accuratezza delle soluzioni dei sistemi lineari calcolate con i precedenti metodi. Studio dell'accuratezza e della stabilità della fattorizzazione QR calcolata con i metodi di Householder, Givens e Gram-Schmidt, utilizzando la backward error analysis; analisi dell'accuratezza della soluzione del problema dei minimi quadrati lineare, calcolata con i metodi suddetti.

Riferimenti bibliografici:

- N.J. Higham, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, 2nd edition, SIAM, 2002 (cap1: § 1.1-1.8, 1.10-1.12; cap. 8: § 8.1; cap. 9: § 9.1-9.4; cap. 10: § 10.1; cap. 19: § 19.1-19.3, 19.6, 19.8; cap. 20: § 20.1-20.4);
- G.H. Golub, C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, 3rd edition, The Johns Hopkins University Press, 1996.

Metodi iterativi per la risoluzione di sistemi lineari

Richiami sui sistemi lineari sparsi e sui metodi iterativi stazionari. Equivalenza tra la risoluzione di sistemi lineari con matrice simmetrica definita positiva e la minimizzazione di funzioni quadratiche strettamente convesse. Metodo del gradiente: formulazione, convergenza, complessità

computazionale. Metodi delle direzioni coniugate. Metodo del Gradiente Coniugato: formulazione, proprietà, convergenza, complessità computazionale. Il metodo del Gradiente Coniugato preconditionato. Precondizionatore di Jacobi, cenni ai preconditionatori basati sulla fattorizzazione incompleta di Cholesky. Metodi di proiezione ortogonale e obliqua: formulazione, interpretazione geometrica, risultati di ottimalità. Metodi di proiezione su sottospazi di Krylov. Il metodo del Gradiente Coniugato come metodo di proiezione su sottospazi di Krylov. Il metodo GMRES: formulazione, breakdown, convergenza.

Riferimenti bibliografici:

- J.R. Shewchuck, *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*, School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, 1994 (<http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf>);
- Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd edition, SIAM, 2003 (cap. 5: § 5.1-5.2; cap. 6: § 6.1-6.3, 6.5.1-6.5.6, 6.11.4).

Trasformata discreta di Fourier e applicazioni all'elaborazione di immagini

Trasformata discreta di Fourier (DFT): definizione, proprietà, trasformata inversa. Relazione tra trasformata continua e trasformata discreta di Fourier. Formulazione matriciale della DFT e proprietà della matrice di Fourier. Algoritmi FFT radix-2 per il calcolo della DFT: versioni "decimation in time" e "decimation in frequency". Cenni sugli algoritmi FFT radix-r. Introduzione all'elaborazione di immagini. Immagini analogiche e digitali e relativi modelli di degradazione. Filtri digitali: definizione e classificazione. Alcuni esempi di filtri digitali: filtro soglia, filtro media, filtro mediano. Filtri digitali per il problema della ricostruzione di immagini nel dominio di Fourier: filtro inverso, filtro inverso generalizzato, filtro di Wiener.

Riferimenti bibliografici:

- E.O. Brigham, *The Fast Fourier Transform and its Applications*, Prentice-Hall, 1988 (cap. 1, 2, 6, 7, 8);
- V. De Simone, *Filtri digitali per problemi di elaborazione di immagini*, Preprint n. 2/2008, Dipartimento di Matematica, Seconda Università degli Studi di Napoli.

Risoluzione numerica di equazioni differenziali ordinarie

Richiami sui problemi di Cauchy per le equazioni differenziali ordinarie. Introduzione ai metodi ad un passo: metodo di Eulero in avanti e metodo di Eulero all'indietro. Consistenza, convergenza e zero-stabilità dei metodi di Eulero, teorema di Dahlquist. Stabilità assoluta ed equazione test, regioni di assoluta stabilità dei metodi di Eulero. Errore di roundoff nei metodi di Eulero. Metodi Runge-Kutta espliciti: derivazione, consistenza, zero-stabilità, convergenza, regioni di assoluta stabilità. Adattatività del passo nei metodi Runge-Kutta, metodi Runge-Kutta Fehlberg.

Riferimenti bibliografici:

- U.M. Ascher, L.R. Petzold, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, SIAM, 1998 (cap. 1: § 1.1; cap. 2: § 2.1-2.4; cap. 3: § 3.1-3.4; cap. 4: § 4.1-4.5).

Risoluzione numerica di equazioni differenziali alle derivate parziali e applicazione ad un problema di inquinamento atmosferico

Richiami sui problemi ai valori iniziali ed al contorno per le equazioni differenziali alle derivate parziali lineari. Metodi alle differenze finite per la risoluzione di problemi ai valori iniziali ed al

contorno per le equazioni di avvezione e di avvezione-diffusione monodimensionali: schemi upwind del primo ordine e schemi centrali del secondo ordine. Consistenza, convergenza e stabilità degli schemi precedenti, teorema di Lax-Richtmyer. Simulazione numerica di un problema semplificato di inquinamento atmosferico modellato da equazioni di avvezione-diffusione monodimensionali e analisi dei risultati.

Riferimenti bibliografici:

- K.W. Morton, D.F. Mayers, *Numerical Solution of Partial Differential Equations. An Introduction*, 2nd edition, Cambridge University Press, 2005 (cap. 4: § 4.1-4.4);
- Friedman, W. Littman, *Industrial Mathematics: A Course in Solving Real-World Problems*, SIAM, 1993 (cap. 2).

2. Attività di laboratorio

Costituiscono parte integrante del programma del corso le attività di laboratorio di seguito elencate, svolte in ambiente Matlab.

- Sviluppo di funzioni per la risoluzione del problema dei minimi quadrati lineare mediante fattorizzazione QR, calcolata con i metodi di ortogonalizzazione di Householder, di Givens e di Gram-Schmidt; applicazione di tali funzioni ad un insieme di problemi test e analisi dei risultati.
- Sviluppo di funzioni che implementano i metodi del gradiente e del gradiente coniugato per la risoluzione di sistemi lineari con matrice simmetrica definita positiva; confronto dei risultati ottenuti con le precedenti funzioni e con la funzione Matlab `pcg`, con e senza preconditionatore (Jacobi, fattorizzazione incompleta di Cholesky), su un insieme di problemi test che metta in luce le proprietà dei metodi considerati.
- Visualizzazione, lettura e scrittura di immagini. Analisi delle immagini in termini di istogramma dei livelli di grigio. Generazione di immagini test. Applicazione degli algoritmi FFT di Matlab a segnali monodimensionali e bidimensionali e visualizzazione dello spettro di ampiezza. Sviluppo di funzioni per la degradazione di immagini e confronto con le funzioni Matlab `imfilter` e `imnoise`. Utilizzo e confronto dei filtri di Matlab per la ricostruzione di immagini nel dominio di Fourier su un insieme di immagini test.
- Sviluppo e testing di una funzione che implementa il metodo di Eulero. Introduzione all'uso delle funzioni Matlab per la risoluzione di equazioni differenziali ordinarie. Applicazione della funzione Matlab `ode45` ad alcuni problemi test e analisi dei risultati.
- Sviluppo di una funzione per la risoluzione di problemi ai valori iniziali ed al contorno per equazioni monodimensionali di avvezione-diffusione. Applicazione di tale funzione ad un modello semplificato di un problema di inquinamento atmosferico ed analisi dei risultati.

Caserta, 19 gennaio 2010

Il docente del corso
Prof. Daniela di Serafino