

# Introduzione al Calcolo Scientifico

Corso di Calcolo Numerico, a.a. 2005/2006

Francesca Mazzia

Dipartimento di Matematica  
Università di Bari

6 Marzo 2006

Insieme degli strumenti, delle tecniche e delle teorie necessarie per risolvere con il computer problemi della scienza e della tecnica.

- nasce negli anni '40 (modellizzazione di problemi balistici e di armi nucleari nella Seconda Guerra Mondiale);
- si sviluppa negli anni '70 e '80 (problemi dell'industria, es. progettazione di aerei);
- si consolida negli anni '90 (problemi di Fisica, Chimica, Ingegneria, Economia, ...).

# CALCOLO NUMERICO

Risoluzione di problemi matematici al calcolatore.

Richiede:

- una conoscenza dello strumento computazionale da usare.
- una conoscenza del problema da risolvere
- la costruzione di un algoritmo che risolva il problema con una accuratezza desiderata ed entro i limiti delle risorse (tempo, memoria, ...) disponibili.

# Il portale delle tecnologie informatiche

<http://www.tecnoteca.it/>

Contiene le seguenti sezioni:

- Accessibilità al web e disabilità
- Calcolo scientifico
  - ▶ Elaborazione numerica e simbolica
  - ▶ Acquisizione ed elaborazione dati
- Comunicare sul web
- Ingegneria del software
- E-Learning
- Linguaggi ed ambienti
- Networking
- Qualità del software

La sezione dedicata al calcolo

<http://www.tecnoteca.it/sezioni/calcolo>

inizia con la seguente frase:

*Da sempre i calcolatori elettronici hanno avuto un ruolo importante nella ricerca scientifica, e la loro crescente potenza permette sempre nuove applicazioni. La mera potenza di calcolo non è però ovviamente l'unico requisito richiesto. Non va infatti sottovalutata l'importanza di avere a disposizione strumenti semplici e di immediato utilizzo che consentono di provare immediatamente un'idea per verificarne subito la bontà.*

# Ambiente computazionale

- hardware: PC o supercomputer (computer vettoriali, computer paralleli);
- sistemi operativi e linguaggi:
  - UNIX, LINUX, WINDOWS, ...
  - C, C++, Java, Fortran95, ...
- data management: costruzione di database contenenti tutte le informazioni rilevanti per un particolare progetto applicativo;
- visualizzazione: rappresentazione grafica finalizzata ad una veloce comprensione del calcolo;

# Linguaggi per il Calcolo Scientifico

Il linguaggio di programmazione per la comunità scientifica è stato per molti anni il Fortran (introdotto negli anni '50). Recentemente anche altri linguaggi, specialmente il C e il C++ e Java, sono usati per il Calcolo Scientifico.

la disponibilità di un linguaggio che può essere usato su una vasta molteplicità di macchine determina la portabilità del software da macchina a macchina con pochissimi cambiamenti nelle performance del codice.

# Problem Solving Environments

Un PSE è un ambiente di alto livello che contiene tutto il software necessario per risolvere una determinata classe di problemi, fra cui

- metodi avanzati per la soluzione;
- selezione automatica o semiautomatica dei metodi di soluzione;
- modi per incorporare facilmente nuovi metodi di soluzione.

Gli utenti possono usarlo senza avere una conoscenza specialistica del computer.

# PSE per il calcolo numerico

- Matlab;
- Scilab;
- Octave.

# MATLAB

MATLAB (MATrix LABoratory) : PSE per il calcolo scientifico ad alte prestazioni e la visualizzazione, integra analisi numerica, calcolo con matrici, grafica. È usato in una varietà di applicazioni e rappresenta un potente strumento di calcolo, visualizzazione e programmazione:

- elaborazione di immagini e segnali;
- progettazione di sistemi di controllo;
- ingegneria finanziaria;
- ricerca in medicina;

<http://www.mathworks.com/>

# SCILAB

È un ambiente di calcolo scientifico simile al Matlab, sviluppato dallo Scilab group ( INRIA-Rocquencourt Metalau Project, Cergrene ENPC). Scilab è un software free scaricabile dal sito:

<http://www.scilab.org/>

Scilab è disponibile per la maggior parte delle piattaforme Unix, per PC con Linux e Windows.

# OCTAVE

GNU OCTAVE è un ambiente di calcolo scientifico simile al Matlab, sviluppato da John W. Eaton e molti altri.

OCTAVE è un software free scaricabile dal sito

<http://www.octave.org/>

Octave è disponibile per la maggior parte delle piattaforme Unix, per PC con Linux e Windows.

# Sorgenti di errori

- Problema reale  $\rightarrow$  Modello Matematico  
semplificazione del modello:  
si suppongono trascurabili alcune grandezze fisiche
- Modello Matematico  $\rightarrow$  Metodo Numerico  
approssimazione nel metodo risolutivo (es. un procedimento infinito approssimato mediante un procedimento finito: errore di troncamento);
- Metodo Numerico  $\rightarrow$  programma  
errori di arrotondamento: i dati numerici elaborati e i risultati delle operazioni eseguite vengono arrotondati (si opera con aritmetica finita, errore di round-off)

# Il processo di risoluzione numerica

- sviluppo di metodi numerici che tengano conto:
  - ▶ della natura del problema;
  - ▶ delle risorse hardware e software;
- sviluppo di un algoritmo o un set di istruzioni che descrivono come risolvere un problema con un calcolatore;
- esame dei diversi aspetti che riguardano la scrittura, la comprensione e la valutazione di algoritmi ed implementazione in un determinato ambiente di calcolo;
- formulazione di problemi test;
- fase di testing e misura dell'efficienza.

ottimizzazione della complessità di tempo e di spazio  
studio accurato dell'algoritmo e della fase di implementazione attraverso:

- la ricerca di tecniche che consentono l'effettiva minimizzazione dei calcoli
- una corretta pianificazione delle aree di memoria da utilizzare

# Alcuni criteri per un buon codice

- affidabilità
- robustezza
- portabilità
- leggibilità
- buona documentazione
- ampia fase di testing

## Libri di testo

- F. Mazzia, D. Trigiante, Laboratorio di Programmazione e Calcolo, Pitagora Editrice, Bologna, 1992.
- P. Amodio, D. Trigiante, Elementi di Calcolo Numerico, Pitagora Editrice, Bologna, 1993.
- James F. Epperson, Introduzione all'analisi numerica, teoria, metodi, algoritmi. McGraw-Hill, Milano, 2003