Esame di Calcolo Numerico — 9 gennaio 2023

Corso di Laurea in Ingegneria Chimica
Tempo a disposizione: 2 ore. È consentito consultare appunti e testi (cartacei).

Esercizio 1 (15 punti) Dato un numero reale $\beta \in \mathbb{R}$, consideriamo la matrice

$$A = \begin{bmatrix} \beta & -1 & & & \\ & \beta & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta & -1 \\ -1 & & & & \beta \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \tag{1}$$

che ha β negli elementi sulla diagonale, e -1 negli elementi della sopradiagonale e nell'elemento di posto $(n, 1)$. Tutti gli altri elementi sono 0. Vogliamo risolvere il sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ con il metodo di Gauss–Seidel.

1. Scrivere le equazioni che permettono di calcolare $\mathbf{x}^{(k+1)}$ a partire da $\mathbf{x}^{(k)}$ nel caso in cui la matrice A è come nella (1).

2. Scrivere una `function x = gs_speciale(beta, b, x1, N)` che, dati in input $\beta \in \mathbb{R}$, $\mathbf{b}, \mathbf{x}^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ e un numero naturale N, calcola il vettore $\mathbf{x}^{(N+1)}$ ottenuto eseguendo N passi del metodo di Gauss–Seidel a partire da $\mathbf{x}^{(1)}$. Per scrivere il codice, utilizzare le equazioni trovate al passo precedente senza memorizzare la matrice A in una variabile. Riportare sul foglio il codice Matlab della funzione.

3. Trovare (in funzione di β) il valore del vettore dei termini noti $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$ tale per cui la soluzione del sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ è
$$\mathbf{x}_* = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

4. Per le due scelte `beta=2` e `beta=1/2`, riportare i valori restituiti da `gs_speciale(beta, b, [1;1;1], 50)`, dove $\mathbf{b}$ è il vettore trovato al punto precedente, e calcolare l'errore $e = \|\mathbf{x}^{(N+1)} - \mathbf{x}_*\|_\infty$. Cosa indicano i valori ottenuti sulla convergenza del metodo nei due casi?

5. (*) Per quali valori di $\beta \in \mathbb{R}$ la matrice A in (1) è predominante diagonale? Cosa permette di concludere questo sulla convergenza del metodo nei due esempi studiati nel punto precedente?

Esercizio 2 (15 punti)

1. Scrivere le equazioni che permettono di calcolare $\mathbf{y}_{n+1}$ a partire da $\mathbf{y}_n$ con il metodo di Runge-Kutta che ha tableau di Butcher
$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}.$$

2. Scrivere una `function [t, Y] = rk(A, N)` che, dato in input il numero di intervalli N e una matrice $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, risolve il problema ai valori iniziali
$$\mathbf{y}' = A\mathbf{y}, \quad \mathbf{y}(a) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad [a, b] = [0, 2\pi] \tag{3}$$
utilizzando il metodo visto al punto precedente. La funzione restituisce il vettore con gli estremi $t = [t_0, t_1, \dots, t_N]$ degli N intervalli (uguali) di discretizzazione, e il valore delle approssimazioni corrispondenti $Y = [\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N]$. Riportare sul foglio il codice Matlab della funzione.

3. Utilizzare la funzione per risolvere il problema (3) con $A = \left[\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{smallmatrix}\right]$ per $N = 20$ e $N = 40$, e riportare nei due casi l'errore globale di discretizzazione $E_N = \max_{n=1,2,\dots,N} \|\mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}_n\|_\infty$ tra la soluzione numerica calcolata e quella esatta `y = [cos(t); -sin(t)]`. Cosa indicano i risultati ottenuti sull'ordine di convergenza del metodo?

Soluzioni

Esercizio 1 (15 punti)

1. Scrivendo le equazioni del metodo si ottiene

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{b_1 + x_2^{(k)}}{\beta}, \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{b_2 + x_3^{(k)}}{\beta}, \\ x_3^{(k+1)} &= \frac{b_3 + x_4^{(k)}}{\beta}, \\ \vdots \quad & \quad \vdots \\ x_{n-1}^{(k+1)} &= \frac{b_{n-1} + x_n^{(k)}}{\beta}, \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{b_n + x_1^{(k+1)}}{\beta}. \end{aligned}$$

2. Una soluzione possibile è la seguente.

```
function x = gs_speciale(beta, b, x1, N)

n = length(b);

x = zeros(n, 1); % in modo da avere un vettore colonna
x = x1;

for k = 1:N
    for i = 1:n-1
        x(i) = (b(i) + x(i+1)) / beta;
    end
    x(n) = (b(n) + x(1)) / beta;
end
```

3. Basta calcolare

$$\mathbf{b} = A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \beta & -1 & 0 \\ 0 & \beta & -1 \\ -1 & 0 & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta - 2 \\ 2\beta - 3 \\ 3\beta - 1 \end{bmatrix}.$$

4. Riportiamo i comandi dati e i risultati ottenuti.

```
>> beta = 2;
>> x = gs_speciale(beta, [beta-2; 2*beta-3; 3*beta-1], [1;1;1], 50)
x =
     1
     2
     3
>> norm(x - [1;2;3], inf)
ans =
     0
>> beta = 1/2;
>> x = gs_speciale(beta, [beta-2; 2*beta-3; 3*beta-1], [1;1;1], 50)
x =
```

```
    1.0e+22 *
    -3.7779
    -3.7779
    -7.5558
>> norm(x - [1;2;3], inf)
ans =
    7.5558e+22
```

I valori ottenuti indicano che il metodo converge per $\beta = 2$ e non converge per $\beta = \frac{1}{2}$.

5. Le equazioni per verificare la predominanza diagonale per la matrice A in (1) corrispondono tutte a $|\beta| > 1$. Quindi la matrice è predominante diagonale quando $\beta \in (-\infty, -1) \cup (1, \infty)$. Un teorema visto a lezione mostra che il metodo di Gauss–Seidel è sempre convergente quando A è predominante diagonale; pertanto questo risultato assicura che il metodo converge per $\beta = 2$. Per $\beta = 1/2$ invece la matrice A non è predominante diagonale, quindi il risultato dimostrato a lezione sulle matrici predominanti diagonali non permette di concludere se il metodo converge o meno.

Esercizio 2 (15 punti)

1. Le equazioni ottenute dal tableau sono

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= f(t_n, \mathbf{y}_n) = A\mathbf{y}_n, \\
\mathbf{k}_2 &= f(t_n + h, \mathbf{y}_n + h\mathbf{k}_1) = A(\mathbf{y}_n + h\mathbf{k}_1), \\
\mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{k}_2\right).
\end{aligned}$$

2. Una possibile soluzione è la seguente.

```
function [t, Y] = rk(A, N)
a = 0;
b = 2 * pi;
h = (b-a) / N;
t = a:h:b;
Y = zeros(2, N+1);
Y(:,1) = [1; 0];
for n = 1:N
    k1 = A*Y(:,n);
    k2 = A*(Y(:,n) + h*k1);
    Y(:,n+1) = Y(:,n) + h/2 * (k1 + k2);
end
```

3. Riportiamo i comandi dati e i risultati ottenuti.

```
>> [t, Y] = rk([0 1; -1 0], 20);
>> E20 = max(max(abs(Y - [cos(t); -sin(t)])))
E20 =
     0.1025
>> [t, Y] = rk([0 1; -1 0], 40);
>> E40 = max(max(abs(Y - [cos(t); -sin(t)])))
E40 =
     0.0257
>> E40 / E20
ans =
     0.2510
```

La riduzione dell'errore di un fattore 1/4 suggerisce che il metodo abbia ordine di convergenza 2.

Nota: Il metodo qui proposto è noto come metodo di Heun e ha effettivamente ordine 2.

Attenzione: il comando `norm(Y - [cos(t); -sin(t)], inf)` calcola una quantità diversa da quella richiesta: la norma-infinito della matrice

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_0 - \mathbf{y}(t_0) & \mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_1) & \dots & \mathbf{y}_N - \mathbf{y}(t_N) \end{bmatrix},$$

che (in base alla definizione di norma-infinito di una matrice) è uguale a

$$F_N = \max_{i=1}^{n} \sum_{j=0}^{N} |(\mathbf{y}_j)_i - (\mathbf{y}(t_j))_i|.$$

L'errore globale invece è il *massimo* delle norme-infinito delle *colonne* di tale matrice, cioè

$$E_N = \max_{j=0}^{N} \max_{i=1}^{n} |(\mathbf{y}_j)_i - (\mathbf{y}(t_j))_i|.$$

Calcolando (erroneamente) questa norma si ottengono i valori $F_{20} = 0.7026$ e $F_{40} = 0.3403$.