

Programma del corso di Metodi numerici per la fisica
Corso di laurea in Fisica (N.O.) – Corso di laurea in Fisica applicata
A.A. 2002/03

Docenti: **Dr. G. G. N. Angilella, Dr. Vito Claudio Latora**

Tutors: Dr. M. Camarda, Dr. A. Pluchino, Dr. S. Spataro

Il corso si occupa della risoluzione numerica di alcuni problemi di interesse per i fisici. Ciò comporta tre livelli di approfondimento: discussione del problema fisico, discussione del modello matematico che lo descrive, discussione di uno o più algoritmi che risolvono tale modello.

Il corso è suddiviso in *6 moduli*. Per ciascun modulo, è previsto un *progetto*, che consiste nell'analisi (fisica, matematica, numerica) e nella soluzione numerica di un ben definito problema fisico.

Il corso prevede una parte *teorica* (in classe) ed una parte *pratica*, in parte dimostrativa (in classe), in parte effettiva (in aula informatica). Durante la parte pratica, gli studenti possono modificare, compilare ed eseguire direttamente i codici messi loro a disposizione per la soluzione dei progetti, sotto la guida dei docenti e dei tutors. L'attività al calcolatore è svolta interamente su piattaforma `linux` e si avvale anche di programmi di manipolazione grafica *open source*, come `gnuplot` e `xmgrace`, di ampio uso in ambito scientifico. Materiale didattico ed ulteriori riferimenti bibliografici sono disponibili in rete, agli indirizzi

`http://www.ct.infn.it/~angilell`

`http://www.ct.infn.it/~latora`

1. Derivazione, integrazione e ricerca di radici.

Formule per il calcolo delle derivate di una funzione. Metodo dei trapezi, metodo di Simpson e formule estese per il calcolo di un integrale. Metodo search, metodo di bisezione, metodo delle secante e metodo di Newton-Raphson per il calcolo degli zeri di una funzione.

Progetto in classe n. 1: *Scattering da potenziale centrale*

2. Sistemi di equazioni lineari e problema agli autovalori.

Richiami di calcolo matriciale. Soluzione di un sistema lineare: metodi diretti e iterativi. Algoritmo di Gauss-Jordan. Complessità computazionale. Metodo di fattorizzazione LU . Metodi di Jacobi e di Gauss-Seidel. Applicazioni: Risoluzione di un circuito elettrico mediante le leggi di Kirchhoff. Progettazione di un ladder network. Distribuzione della temperatura in una lastra piana*. Soluzione di un sistema non lineare*. Autovalori ed autovettori: richiami. Metodo del quoziente di Rayleigh*. Metodo delle potenze. Metodo di fattorizzazione QR *.

Progetto in classe n. 2: *Modi normali di una catena unidimensionale: caso periodico e caso quasi-periodico.*

Matrici come rappresentazioni di grafi. Cenni di teoria dei grafi. Operazioni con la matrice di adiacenza. Applicazioni a networks reali.

Progetto in classe n. 2-bis: *Algoritmo per il calcolo dello Shortest Path su di un grafo pesato.*

3. Equazioni differenziali ordinarie (ODE).

Problema ai valori iniziali. Teorema di Cauchy di esistenza ed unicità della soluzione. Cenni sui metodi di soluzione analitici. Esempio di utilizzo di ODE in fisica e non. Metodo di Eulero e sue varianti. Metodi Runge-Kutta. Cenni sugli altri metodi di risoluzione numerica. Sistemi Hamiltoniani e equazioni del moto nella forma di Hamilton. Sistemi integrabili: enunciato del teorema di Liouville-Arnold. Sistemi non integrabili: regioni regolari e regioni caotiche. Sezioni di Poincarè

Progetto in classe n. 3: *Ordine e caos nel modello di Henon-Heiles.*

4. Equazioni differenziali alle derivate parziali (PDE).

PDE di interesse per la fisica. Classificazione delle PDE lineari del 2° ordine e delle condizioni al contorno (cenni). Equazione di Poisson. Motivazione fisica: problema fondamentale dell'elettrostatica; distribuzione stazionaria di temperatura. Derivazione variazionale. Discretizzazione dell'equazione e del funzionale (energia elettrostatica). Metodo iterativo (di Liebmann). Condizioni al contorno di Dirichlet e di Neumann*. Trasformate di Fourier discrete. Soluzione dell'equazione di Poisson mediante le Fast Fourier Transforms. Linee equipotenziali.

Progetto in classe n. 4: *Soluzione numerica dell'equazione di Poisson.*

5. Introduzione ai metodi Monte Carlo.*

Cenni di calcolo delle probabilità. Valori medi ed altre caratteristiche di una distribuzione di probabilità. Distribuzione binomiale, gaussiana e di Poisson. Generatori di numeri casuali. Problema del campionamento: generazione di variabili random con

una data distribuzione. L'algoritmo di Metropolis. Esempi di come vengono utilizzati i metodi di simulazione Monte Carlo in fisica.

Progetto in classe n. 5: *Calcolo di integrali a più dimensioni e simulazione di decadimenti radioattivi.*

6. Approssimazione di funzioni e fitting di dati.*

Approssimazione di funzioni. Interpolazione mediante polinomi. Interpolazione mediante splines. Interpolazione mediante polinomi trigonometrici (serie di Fourier). Approssimanti di Padé. Metodi di fit basati su algoritmi genetici. Fitting di dati. Richiami: distribuzioni teoriche, legge di Gauss, principio di massima verosimiglianza, metodo del minimo χ^2 . Interpolazione dei dati con una funzione assegnata: caso lineare e non lineare, pesato e non pesato.

Progetto in classe n. 6: *Uso di programmi di manipolazione grafica per il fit di dati sperimentali.* Uso di `gnuplot` per il fit di dati sperimentali.

Libri di testo

1. S. E. Koonin, D. C. Meredith, *Computational physics* (Addison-Wesley, Redwood, 1990). Con esempi in Fortran, disponibili anche online all'URL:
`www.computationalphysics.info`.
2. G. Naldi, L. Pareschi, G. Russo, *Introduzione al calcolo scientifico* (McGraw-Hill, Milano, 2001).
3. J. F. Epperson, *Introduzione all'analisi numerica* (McGraw-Hill, Milano, 2003).