

Programma del Corso di
Fisica Computazionale

Introduzione

Errori algoritmici e numerici. Convergenza.

Algebra lineare

Generalita'. Metodi di eliminazione (LU, Gauss) e iterativi (Gauss-Jacobi, -Seidel, SOR) per sistemi lineari condizionati. Metodo SVD per sistemi malcondizionati o singolari. Diagonalizzazione. Esempi di applicazione: ricerca di zeri multidimensionale, fit lineare generalizzato.

Equazioni differenziali a derivate parziali

Classificazione di PDE in 2 dimensioni. Equazioni paraboliche: diffusione; metodo FTCS; applicazione a un modello di reazione a catena. Equazioni ellittiche: metodi iterativi Jacobi-Seidel-SOR; applicazione problemi di elettrostatica (condensatori, gabbia di Faraday). Equazioni iperboliche: metodi impliciti; pacchetti d'onde.

Molecular simulations

Generalita' sui metodi Montecarlo. Fondamenti e ingredienti della dinamica molecolare e del metodo Montecarlo Metropolis. Semplici applicazioni alle proprieta` strutturali e dinamiche di sistemi condensati.

Testi:

W. Press et al., Numerical recipes in f77
A. L. Garcia, Numerical methods for physics
R. Landau, B. Paez, Computational physics
D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulations