

Programma – FISICA COMPUTAZIONALE:

Il corso introduce sia ai concetti della computazione numerica che della programmazione scientifica in linguaggio Fortran 95.

Vengono pertanto dedicate inizialmente 4 ore settimanali di teoria e 2 ore di laboratorio informatico (sistema Linux)

Successivamente, in base alla complessità dei codici sviluppati, vengono dedicate 2 ore di teoria e 4 ore settimanali di laboratorio.

Lezione 1 - Introduzione alla fisica numerica. Rappresentazione numerica nei computer. Errori di arrotondamento

Lezione 2 - Introduzione alla programmazione scientifica e al linguaggio Fortran 90/95

Lezione 3 - Algoritmi di base: ricerca degli zeri di una funzione

Lezione 4 - Quadrature. Metodi trapezoidali, Simpsons, analisi degli errori, quadrature Gaussiane

Lezione 5 - Lab. Implementazione del metodo delle quadrature gaussiane.

Lezione 6 - Quadrature adattative di Simpsons, Gauss-Kronrod, Gauss-Lobatto

Lezione 7 - Lab. Codifica di un metodo adattativo ed esempio su una funzione patologica

Lezione 8 - Introduzione alle equazioni differenziali ordinarie (ODE)

Lezione 9 - Lab. Codifica del metodo di eulero e metodo predictor-corrector

Lezione 10 - Lab. Metodi di Runge-Kutta e metodo RK4

Lezione 11 - Metodi adattativi espliciti e metodi impliciti.

Lezione 12 - Lab. Codifica del metodo RK45 di Dormant-Prince

Lezione 13 - Introduzione al caos.

Lezione 14 - Lab. Pendolo caotico. Sezioni di Poincaré e biforcazioni.

Lezione 15 - Lab. L'attrattore di Lorenz. Derivazione da Navier-Stokes ed implementazione.

Lezione 16 - Teoria delle biforcazioni di Feigenbaum applicata alla mappa logistica.

Lezione 17 - Integrazione nel tempo di equazioni dinamiche: la Dinamica Molecolare (MD)

Algoritmo Velocity Verlet

Lezione 18 - Lab. Creazione di un simulatore MD applicato ad un gas di Lennard-Jones

Imposizione di condizioni periodiche al contorno. Varie tecniche (liste linkate)

Lezione 19 - Lab. Estrazione di numeri casuali secondo la distribuzione di Maxwell-Boltzmann

Implementazione della funzione di correlazione $g(r)$

Lezione 20 - Lab. Simulazione e studio delle transizioni di fase nel gas di LJ.

Lezione 21 - Introduzione alle equazioni differenziali alle derivate parziali (PDE)

Classificazione, metodo a differenze finite e condizioni al contorno

Lezione 22 - Lab. Risoluzione numerica dell'equazione di Poisson.

Metodo iterativo di Jacobi e Gauss-Siedel

Lezione 23 - Equazioni paraboliche del calore e di advection-diffusion. Stabilità

Lezione 24 - Lab. Equazioni di Navier-Stokes per un fluido incomprimibile.

Discussione dei problemi nell'uso del metodo alle differenze finite. Introduzione ai metodi di integrazione a volumi finiti.

Lezione 25 - Lab. Stabilizzazione delle equazioni mediante metodo upwind.

Metodo SIMPLE. Imposizione della continuità. Equazione per la pressione.

Lezione 26 - Lab. fluido bidimensionale con condizione slip-slit su una parete.

Risoluzione delle equazioni: metodo iterativo di Thomas e under-relaxation