Física computacional

(http://teorica.fis.ucm.es/ft8/FisicaComp.html)

Profesor: M.J. Rodríguez Plaza, Departamento de Física Teórica I.
Carácter: Optativo. **Curso:** 3º Grado y 4º Licenciatura en Física (o equivalente).

Programa

1. **Métodos numéricos para ecuaciones algebraicas.**
   – Cálculo de los ceros de una función. Método de Newton y método iterativo. Aplicaciones contractivas.
   – Resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas (no lineales). Método de Newton-Raphson.

2. **Sistemas de ecuaciones lineales.**
   – Métodos para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Método de eliminación de Gauss y factorización matricial.

3. **Cosas sueltas muy interesantes.**
   – Richardson's extrapolation.

4. **Integración numérica.**
   – Fórmulas clásicas con abscisas igualmente espaciadas (método trapezoidal, Simpson..)
   – Fórmulas extendidas (o compuestas): únicamente trapezoidal y Simpson, nada más.
   – Cuadratura Gaussiana.
   – Romberg's integration.

5. **Números aleatorios. Métodos de Monte Carlo y aplicaciones:**
   – Generadores de números aleatorios. Método de las congruencias lineales, Efecto Marsaglia. Transformaciones de variables aleatorias.
   – Cálculo de integrales definidas. Estimación del error. Otras aplicaciones interesantes.

6. **Métodos numéricos para problemas diferenciales ordinarios de valores inicales.**
   – El (los) método(s) de Euler.
   – Métodos de un paso. Métodos multipaso.
   – Aplicaciones: movimiento planetario, precesión del perihelio de Mercurio...

7. **Métodos numéricos para problemas diferenciales ordinarios de contorno.**
   – Métodos de disparo lineal y no lineal.
   – Método de diferencias finitas.

8. **Métodos numéricos para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.**
   – Ecuación del calor. Método de Crank-Nicholson.
   – Solución de la ecuación de Poisson por diferencias finitas

Maple se utilizará como programa de manipulación algebraica a lo largo del curso y lo facilitará el profesor bajo licencia UCM. Se debe adquirir pues una cierta habilidad en la preparación de códigos Maple para implementar estos métodos.

El profesor hace notar que esta asignatura es "time consuming". De ninguna manera hay que darle más tiempo del que le corresponde a costa de quitárselo a otras asignaturas. Eso nunca. Pero si se deja para el último día, los programas no salen. Es un **teorema**.

Bibliografía

[1] D. Kincaid and W. Cheney, *Análisis numérico.* Addison-Wesley Iberoamericana. Wilmington, DE 1994.

[2] D. Faires and R. Burden, *Métodos numéricos.* Thomson. Madrid, 2004.

Las versiones más modernas contienen ejemplos en Maple. Si se coge uno de estos le será útil.

[3] B. Carnahan, H.A Luther and J.O. Wilkes, *Cálculo numérico, métodos y aplicaciones.* Editorial Rueda, Madrid 1979.

[4] Press, W.H, Teukolsky, S.A, Vetterling, W.T. and Flannery, B.P., *Numerical recipes in C: the art of scientific computation*, CUP, 1996.

Referencia que va directamente al grano y se agradece. Trae algunos ejemplos y no trae ejercicios. Un clásico del cálculo científico en el que se puede confiar. Muchos capítulos están en la red en formato pdf (todos?) y también está en la biblioteca de Físicas.

[5] Binder, K. and Heermann, D.W., *Monte Carlo simulation in Statistical Physics*, Springer, 1997.

Un texto avanzado. Quizás sólo útil para aquellos estudiantes que quieran educarse ellos mismos en las lagunas que no cubren los cursos universitarios. Obviamente está orientado a la Física Estadística, pero de cualquier manera está bien.

[6] Knuth, D.E., *Seminumerical Algorithms* in *The Art of Computer Programming, vol 2*, Addison-Wesley, 1998.

Lo usaremos en el tema de *números aleatorios* y poco más. Pero trae de muchos temas: generación de *números aleatorios*, tests, factorización en primos, algoritmo de Euclides, factorización de polinomios, sorting, por citar sólo algunos apartados. Donald E. Knuth fue el creador de TeX, aunque como dice uno de los profesores de esta casa, 'eso es lo más pequeño que ha hecho'. El Prof. Knuth mantiene una página web http://www-cs-faculty.stanford.edu/∼knuth/ y muchos capítulos de su libro están en esa página o en sus enlaces.

[7] Landau, R.H. and Páez, M.J. *Computational Physics: Problem solving with computers*, John Wiley and Sons, 1997.

Habla de muchas cosas le de poco tiempo a hacer hincapié en las importantes. El valor que yo le doy es que trae los códigos numéricos en las últimas hojas y que informa de lo que uno puede hacer en Física con cálculo numérico.

[8] Sokal, Alan D., *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics.* Lectures at the Cargèse Summer School on "Functional Integration: Basics and Applications", September 1996.

Aunque ya tiene algunos años y el autor no las actualiza –si lo hiciera no haría otras cosas– estas 'lectures' siguen estando muy bien porque Alan Sokal es muy bueno. Están en la red.

[9] P.O.J. Scherer, *Computational physics: simulations of classical and quantum systems.* Springer, Berlín 2010.

Trae un poco de Monte Carlo. Poco.

Sobre las referencias: Básicas: las cuatro primeras. Complementarias: el resto. De Monte Carlo: se dice explicitamente.