
Índex

PRÒLEG	13
Capítol 1. La precisió del càlcul	17
1.1 Els nombres dins de l'ordinador.....	17
1.2 Dificultats amb l'ús de nombres enters	19
1.3 Dificultats amb l'ús de nombres reals	21
1.4 Relacions de recurrència	26
1.4.1 Avaluació de polinomis	26
1.4.2 Funcions especials.....	27
1.4.3 Sèries de Fourier	29
1.4.4 Fraccions contínues	31
1.5 Algorismes iteratius.....	34
1.6 Iteracions i caos	37
Capítol 2. Resolució d'equacions no lineals	41
2.1 Introducció	41
2.2 Mètode de bisecció.....	42
2.3 Mètode de <i>regula falsi</i>	44
2.4 Mètodes de convergència quadràtica	45
2.4.1 Interpolació quadràtica: algorisme de Brent	46
2.4.2 Mètode de Newton-Raphson.....	46
2.5 Exemple d'aplicació dels algorismes	49
2.6 Sistemes no lineals de més d'una variable	51
2.7 Polinomis: operacions bàsiques.....	52
2.7.1 Representació de polinomis	52
2.7.2 Producte de polinomis.....	55
2.7.3 Divisió de polinomis	56
2.7.4 Màxim comú divisor de dos polinomis	58
2.8 Arrels d'un polinomi	60
2.9 El mètode de Bairstow	61

2.10	Codi FORTRAN per a l'algorisme de Bairstow	63
2.11	Càlcul de totes les arrels d'un polinomi	68
2.12	L'equació de van der Waals	69
Capítol 3. Problemes lineals		75
3.1	Problemes d'àlgebra lineal	75
3.2	Descomposició LU d'una matriu	77
3.3	Càlcul del determinant d'una matriu	81
3.4	Codi FORTRAN per a la descomposició LU	82
3.5	Sistema lineal d'equacions	84
3.6	Inversió d'una matriu	87
3.7	Condicció d'una matriu	90
3.7.1	Norma d'un vector i d'una matriu.....	91
3.7.2	Estabilitat d'un problema numèric	92
3.7.3	Condicció d'una matriu.....	92
3.8	Les lleis de Kirchhoff	95
Capítol 4. Valors i vectors propis		99
4.1	Teoremes generals	99
4.2	Mètode de Jacobi.....	100
4.2.1	Programa per a l'algorisme de Jacobi	103
4.3	Tridiagonalització de matrius	104
4.3.1	Mètode de Householder	105
4.4	Valors propis d'una matriu tridiagonal	106
4.4.1	Seqüències de Sturm	107
4.4.2	Localització dels valors propis.....	109
4.4.3	Codi FORTRAN per a matrius tridiagonals.....	113
4.5	Comentaris finals.....	115
4.6	Petites oscil·lacions	116
4.6.1	Una molècula exòtica.....	121
Capítol 5. Interpolació i integració numèrica		125
5.1	Interpolació polinòmica.....	125
5.1.1	Programa per a la interpolació de Newton	127
5.2	Integració numèrica.....	129
5.2.1	Integració repetida.....	130
5.2.2	Subrutina trapezoïdal	132
5.2.3	Mòdul intern de la regla trapezoïdal	132

5.3	La regla de suma d'Euler-McLaurin	133
5.3.1	Exemples de la regla de suma d'Euler-McLaurin.....	134
5.3.2	Suma de sèries lentament convergents.....	135
5.3.3	Extrapolació de Richardson	137
5.3.4	Codi FORTRAN per a la integració de Romberg	138
5.4	Integrals singulars.....	139
5.5	Regles gaussianes	140
5.6	Determinació del període d'un pèndol	141
5.6.1	El pèndol i les transformacions d'escala.....	143
 Capítol 6. Determinació de mínims i màxims		147
6.1	Introducció.....	147
6.2	Mínims de funcions d'una variable	149
6.2.1	Fitació de mínims	149
6.2.2	Programa per a la fitació de mínims.....	151
6.2.3	Determinació de mínims fitats	152
6.2.4	Programa FORTRAN per a la determinació de mínims per la raó àuria.....	154
6.2.5	Altres mètodes.....	155
6.2.6	Exemples de determinació de mínims.....	156
6.3	Mínims de funcions de moltes variables	158
6.3.1	El mètode del símplex	159
6.3.2	El programa SIMPLEX	163
6.3.3	El programa interactiu MINSIMPL	167
6.3.4	Determinació pràctica dels mínims de funcions de més d'una variable.....	170
 Capítol 7. Modelatge de dades experimentals		173
7.1	Ajusts per mínims quadrats	173
7.2	Funcions lineals dels paràmetres.....	176
7.2.1	El programa MINQUADL	178
7.2.2	Ús del programa MINQUADL	182
7.2.3	Fórmula semiempírica de les masses nuclears.....	186
7.3	Funcions no lineals dels paràmetres.....	188
7.3.1	El programa MINQUADG	191
7.3.2	Maneig del programa MINQUADG	196
7.4	Qualitat dels ajusts.....	198
7.4.1	La distribució <i>chi-quadrat</i>	199
7.4.2	Error associats als paràmetres de l'ajust.....	200
7.5	Ajusts de dades classificades.....	204

Capítol 8. Equacions diferencials ordinàries	207
8.1 Equacions de la dinàmica	207
8.2 Equacions diferencials ordinàries.....	208
8.3 Construcció d'algorismes d'integració.....	209
8.4 Exemples il·lustratius	211
8.4.1 Mètode d'Euler.....	211
8.4.2 Mètode associat a la regla trapezoïdal	213
8.5 Qualitat de les regles d'integració	215
8.5.1 El programa EULER	216
8.5.2 El programa EQDIFS	219
8.5.3 Ús del programa EQDIFS	221
8.6 Regles de passos múltiples	224
8.6.1 L'algorisme de Bulirsch-Stoer	224
8.6.2 Exemple il·lustratiu del mètode dels passos múltiples.....	227
8.6.3 Els mètodes de Runge-Kutta	228
8.7 El pèndol	232
 Capítol 9. Problemes de condicions de contorn	 237
9.1 Introducció.....	237
9.2 El problema de dos punts	238
9.3 Equacions diferencials lineals	243
9.3.1 El mètode de superposició	243
9.3.2 Mètode matricial	249
9.4 Problemes de valors propis.....	254
9.4.1 L'equació de Schrödinger.....	254
9.4.2 Discretització de l'equació de Schrödinger.....	257
9.4.3 La subrutina SCHRTRID	258
9.4.4 L'extrapolació de Richardson.....	263
9.4.5 Determinació de la funció d'ones	266
9.4.6 Exercicis suplementaris.....	270
9.5 La teoria de bandes.....	270
 Capítol 10. El mètode de Montecarlo	 277
10.1 Conceptes bàsics d'estadística	278
10.1.1 Variables aleatòries i funcions de distribució de probabi- litat	278
10.1.2 Algunes funcions de distribució	279
10.1.3 Valors esperats	280
10.1.4 El teorema del límit central.....	281
10.1.5 Significat del teorema del límit central	282
10.1.6 Generalització del teorema del límit central.....	283
10.1.7 Funcions de distribució de moltes variables.....	284

10.2	Generació de nombres a l'atzar	285
10.2.1	La distribució uniforme	286
10.2.2	Mètode del canvi de variables	291
10.2.3	Mètode d'acceptació-rebuig	294
10.2.4	Resum	297
10.3	Càlcul d'integrals definides.....	299
10.3.1	El mètode d'encert-fallada.....	299
10.3.2	El mètode cru de Montecarlo.....	302
10.3.3	Millores del mètode cru de Montecarlo.....	304
10.3.4	Integrals multidimensionals.....	306
10.4	Comentari final.....	312
 Capítol 11. Simulació de sistemes físics		313
11.1	Problemes de probabilitat.....	313
11.2	Passejades aleatòries	314
11.3	La desintegració radioactiva	317
11.4	Apantallament de la radiació.....	321
11.5	Simulació i teoria d'errors.....	325
11.6	L'error de dispersió	329
11.7	Simulació mecànica	332
 Bibliografia		335