



PROGRAMA DE ASIGNATURA

| | |
|---|-------------------|
| ASIGNATURA: Física Computacional | AÑO: 2011. |
| CARÁCTER: Curso de Posgrado | |
| DOCENTES ENCARGADOS: Adolfo J. Banchio y Verónica I. Marconi | |

CONTENIDOS

Unidad I: Métodos Numéricos y Caos

Integración numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias. Cálculo numérico de integrales. Transformada rápida de Fourier, uso de la biblioteca FFTW. Aplicaciones a problemas de Caos: mapeo logístico y caos hamiltoniano. Cálculo de exponentes de Lyapunov y secciones de Poincaré.

Unidad II: Dinámica molecular

Introducción al método de dinámica molecular. Algoritmos de integración de Verlet. Condiciones de contorno periódicas y mínima imagen. Aplicaciones a transiciones de fases. Cálculo de función de correlación de pares, de factor de estructura y de coeficiente de difusión.

Unidad III: Ecuaciones en derivadas parciales

Método de diferencias finitas. Análisis de estabilidad. Solución de la ecuación de difusión.

Unidad IV: Simulaciones estocásticas

Generadores de números aleatorios. Tests de los algoritmos. Caminatas al azar. Aplicaciones a Fractales aleatorios. Integración de ecuaciones diferenciales estocásticas (Ecuación de Langevin - Brownian Dynamics). Aplicación a ratchets.

Unidad V: Método de Monte Carlo

Procesos de Markov: definición. Propiedades límites, balance detallado y baño térmico. Algoritmo de Metrópolis. Medición de valores medios y funciones de correlación. Aplicación al modelo de Ising. Exponentes críticos, cumulantes de Binder, escaleo de tamaño finito.

Unidad VI: Autoestados y Autovalores en Física Cuántica

Ecuación estacionaria de Schrödinger, diagonalización de matrices y uso de la biblioteca LAPACK.



BIBLIOGRAFÍA

- 1- Koonin, *Computational Physics*.
- 2- Allen and Tildesley, *Computer simulations of liquids*.
- 3- Frenkel and Smith “*Understanding Molecular Simulations*” *From Algorithms to Applications*.
- 4- Pang, *An introduction to Computational Physics*.
- 5- Landau y Paez, *Computational Physics*.
- 6- K.Binder y D.W.Heermann, *MonteCarlo Simulation in Statistical Physics*.
- 7- Press *et al.*, *Numerical Recipes*.
- 8- Thijssen, *Computational Physics*.

FORMAS DE EVALUACIÓN

- Entrega obligatoria de trabajos prácticos después de cada unidad.
- Desarrollo de un trabajo especial, dentro de los plazos establecidos para su entrega, cuyo informe escrito será defendido el día del examen final.

CONOCIMIENTOS PREVIOS REQUERIDOS

- Conocimientos básicos de Mecánica Estadística.
- Manejo de algún lenguaje de programación (preferentemente Fortran o C).