



PROGRAMA DE ASIGNATURA

ASIGNATURA: Física Computacional	AÑO: 2012.
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: Ecuaciones en derivadas parciales

Método de diferencias finitas. Análisis de estabilidad. Aplicaciones.

Unidad III: Números aleatorios y aplicaciones

Generadores de números aleatorios. Tests de los algoritmos. Caminatas al azar. Integración de Monte Carlo.

Unidad IV: Método de Monte Carlo

Sampleo por importancia. Algoritmo de Metrópolis. Medición de valores medios y funciones de correlación. Aplicaciones: (a) Modelo de Ising, exponentes críticos, cumulantes de Binder, escaleo de tamaño finito. (b) Fluidos de Lennard-Jones.

Unidad V: 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 VI: Dinámica Browniana

Integración de la Ecuación de Langevin. Aplicación a Brownian Dynamics.

Unidad VII: Autoestados y Autovalores en Física Cuántica

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



BIBLIOGRAFÍA

- 1- Landau y Paez, *Computational Physics*.
- 2- Frenkel and Smith “*Understanding Molecular Simulations*” *From Algorithms to Applications*
- 3- Allen and Tildesley, *Computer simulations of liquids*
- 4- K.Binder y D.W.Heermann, *MonteCarlo Simulation in Statistical Physics*.
- 5- Press *et al.*, *Numerical Recipes*.
- 6- Pang, *An introduction to Computational Physics*.
- 7- Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos*.
- 8- Koonin, *Computational Physics*.
- 9- 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 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).