



### PROGRAMA DE ASIGNATURA

<b>ASIGNATURA:</b> FÍSICA COMPUTACIONAL	<b>AÑO:</b> 2017
<b>CARÁCTER:</b> Especialidad	
<b>CARRERA/s:</b> Lic. en Física	
<b>RÉGIMEN:</b> cuatrimestral	<b>CARGA HORARIA:</b> 120
<b>UBICACIÓN en la CARRERA:</b> cuarto/quinto año	

#### FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

La Física Computacional se ocupa de realizar cálculos y simulaciones computacionales con el fin de resolver problemas físicos concretos, y es un ingrediente importante dentro de la más amplia e interdisciplinaria “Ciencia Computacional”.

El objetivo del curso es darle a los estudiantes una visión global y actualizada de la física computacional, y de los distintos métodos numéricos y herramientas disponibles. En el curso se abordarán los diferentes temas utilizando ejemplos y aplicaciones de interés para distintas áreas de la física, biofísica, astronomía, química. Esto se hará, planteando un problema y luego dando la teoría/modelo para resolverlo, y el método y la implementación como últimos pasos. Ayudando así, a ubicar el tema en un contexto más amplio e indica cómo los mismos pasos son aplicables a una clase más amplia de problemas en diversas áreas de la ciencia.

El curso está pensado para estudiantes de todas las áreas, tanto teóricas como experimentales, que quieran tener conocimientos de técnicas básicas de física computacional, y aprender a implementarlas. Es un curso elemental y relevante tanto para quien se forme como futuro especialista en física computacional, como para quien haga física teórica o experimental.

El curso tiene como requisitos tener conocimientos básicos de Mecánica Estadística y manejo de algún lenguaje de programación (preferentemente Fortran90 ó C).

**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 sobreamortiguada. 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 BÁSICA**

- 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- Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos*.
- 6- Koonin, *Computational Physics*.

**BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

- Press *et al.*, *Numerical Recipes*.
- Thijssen, *Computational Physics*.
- Pang, *An introduction to Computational Physics*.

**METODOLOGÍA DE TRABAJO**

Se dictarán clases teóricas de 2 horas y posteriormente 2 horas de trabajos prácticos en laboratorios. En las clases teóricas se otorgará la bibliografía adecuada para cada unidad de modo de tener previamente el material de lectura y las mismas constarán de mínimas introducciones a los temas físicos, biológicos, etc, que se tomarán como ejemplo para resolver numéricamente. Se centrará gran parte del teórico en la metodología numérica y técnica para resolver dichos problemas computacionales. Se hará hincapié en las ventajas y desventajas de cada método, ejemplificando con temas de actual interés y otorgando las librerías más modernas a utilizarse en cada caso. Gran importancia se dará a entender en cada método cuáles son las aproximaciones del problema físico involucrado, sumadas a las aproximaciones y/o errores inherentes al método numérico mismo.

La materia se dará en base al método “aprender-haciendo”, por lo tanto, los laboratorios son de gran importancia, al igual que el trabajo individual del alumno más allá de las horas del curso. Las clases prácticas en laboratorio se iniciarán con exposiciones a cargo de profesores de las técnicas específicas computacionales a usarse en los ejercicios del día y se darán ayudas prácticas de uso diario en programación, detalles que se obtienen con la experiencia y es difícil encontrar en bibliografía, por lo cual la asistencia a los laboratorios es de importancia.

Durante el dictado teórico de cada unidad se dará una guía de problemas numéricos que el alumno irá desarrollando simultáneamente en el laboratorio. Luego de una semana de haber terminado cada unidad, el alumno deberá entregar la resolución de algunos problemas de cada guía.

## EVALUACIÓN

- *Evaluaciones parciales:* entrega obligatoria de trabajos prácticos después de cada unidad con régimen de recuperación.

Los profesores a cargo no solo corregirán los informes sino también corregirán el modo de programar, los códigos entregados línea a línea, para ir a lo largo del curso mejorando la técnica numérica de los alumnos.

- Desarrollo de un trabajo especial, dentro de los plazos establecidos para su entrega, cuyo informe será defendido el día del examen final.

**Correlativas:** Métodos Numéricos (aprobada).

**Regularidad:** haber entregado y aprobado en término las guías de problemas.

**Evaluación final:** los alumnos regulares solo resolverán un problema numérico original, de su propio interés y que sea una ampliación y/o aplicación de alguna unidad dada. La defensa del tema será oral, previa entrega de informe y programa.

**Alumnos libres:** deberán entregar todas las unidades quince días previos al final y se evaluarán en examen final oral, no sólo su trabajo final sino todas la unidades.