



EXP-UNC: 38074/2017

Res. CD N°265/2017

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Física Computacional	AÑO: 2017
CARACTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
REGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

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).

CONTENIDO

Unidad III: Números aleatorios y aplicaciones

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

Unidad II: Ecuaciones en derivadas parciales

Método de diferencias finitas. Análisis de estabilidad. Aplicaciones.

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 VII: Autoestados y Autovalores en Física Cuántica

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

Unidad VI: Dinámica Browniana

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

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 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.

BIBLIOGRAFÍA

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

- 1- Press et al., Numerical Recipes.
- 2- Thijssen, Computational Physics.
- 3- Pang, An introduction to Computational Physics.

EVALUACIÓN

FORMAS DE 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 sera defendido el día del examen final.

Examen Final

Los alumnos regulares solo resolverán un problema numérico, 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.

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

REGULARIDAD

Haber entregado y aprobado en termino las guías de problemas.

PROMOCIÓN

No hay régimen de promoción en el cursado de la materia.

CORRELATIVIDADES

Para cursar: tener regularizadas Métodos Numéricos y Termodinámica y Mecánica Estadística I

Para rendir: tener aprobadas Métodos Numéricos y Termodinámica y Mecánica Estadística I

