



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



FAMAF  
Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EX-2021-00255127- -UNC-ME#FAMAF

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
<b>ASIGNATURA:</b> Física Computacional	<b>AÑO:</b> 2021
<b>CARACTER:</b> Especialidad	<b>UBICACIÓN EN LA CARRERA:</b> 5° año 1° cuatrimestre
<b>CARRERA:</b> Licenciatura en Física	
<b>REGIMEN:</b> Cuatrimestral	<b>CARGA HORARIA:</b> 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 dando su teoría o modelo para resolverlo, y el método y la implementación como últimos pasos. Se ubicará el tema en un contexto más abarcativo y se explicará 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 I: Métodos Numéricos y Caos

Representación de números en la Máquina. Diferenciación Numérica. Cálculo numérico de integrales. Integración numérica de Ecuaciones Diferenciales. Errores de algoritmos vs redondeo. Transformadas de Fourier: DFT, FFT, FFTW (uso de librerías). Caos y sus diversas aplicaciones. Cálculo de exponentes de Lyapunov, bifurcaciones, espectros de potencia y secciones de Poincaré.

##### Unidad II: Ecuaciones en derivadas parciales

Método de diferencias finitas: Euler hacia adelante y hacia atrás; Crank-Nicolson. Análisis de estabilidad. Aplicaciones.

##### Unidad III: Números aleatorios y aplicaciones

Generadores de números aleatorios. Caminatas al azar. Integración de Monte Carlo. Muestreo por importancia.

##### Unidad IV: Método de Monte Carlo

Procesos de Markov. Algoritmo de Metrópolis. Medición de valores medios y funciones de correlación. Aplicaciones: (a) Modelo de Ising, exponentes críticos, cumulantes de Binder, escalado 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.

#### BIBLIOGRAFÍA



EX-2021-00255127- -UNC-ME#FAMAF

### **BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

- 1- Landau y Paez, Computational Physics. Ed. 2010.
- 2- Frenkel and Smith, Understanding Molecular Simulations From Algorithms to Applications. Ed. 2002.
- 3- Allen and Tildesley, Computer simulations of liquids. Ed. 1989.
- 4- K.Binder y D.W.Heermann, MonteCarlo Simulation in Statistical Physics. Ed. 2010.
- 5- Strogatz, Nonlinear Dynamics and Chaos. Ed. 2015.
- 6- Koonin, Computational Physics. Ed. 1990.

### **BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

- 1- Press et al., Numerical Recipes. 3ra. Ed. 2007.
- 2- Thijssen, Computational Physics. 2nd Ed. 2007.
- 3- Pang, An introduction to Computational Physics. 2da. Ed. 2012.

## **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:

Regularizada Métodos Numéricos + Termodinámica y Mecánica Estadística I

Para rendir:

Aprobada Métodos Numéricos + Termodinámica y Mecánica Estadística I