

EX-2025-00111784- -UNC-ME#FAMAF

<b>PROGRAMA DE ASIGNATURA</b>	
<b>ASIGNATURA:</b> Física Computacional	<b>AÑO:</b> 2025
<b>CARACTER:</b> Especialidad	<b>UBICACIÓN EN LA CARRERA:</b> 5° año 1° cuatrimestre
<b>CARRERA:</b> Licenciatura en Astronomía	
<b>REGIMEN:</b> Cuatrimestral	<b>CARGA HORARIA:</b> 120 horas

<b>ASIGNATURA:</b> Física Computacional	<b>AÑO:</b> 2025
<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

<b>ASIGNATURA:</b> Física Computacional	<b>AÑO:</b> 2025
<b>CARACTER:</b> Especialidad	<b>UBICACIÓN EN LA CARRERA:</b> 5° año 1° cuatrimestre
<b>CARRERA:</b> Licenciatura en Matemática	
<b>REGIMEN:</b> Cuatrimestral	<b>CARGA HORARIA:</b> 120 horas

#### FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

La Física Computacional es una rama de la física que se centra en cálculos y simulaciones numéricas 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 las/los estudiantes una visión global de la física computacional, y de los distintos métodos numéricos y herramientas disponibles. En la materia se abordarán los diferentes temas utilizando ejemplos de distintas áreas de la física, como materia condensada, materia blanda, materia activa, fluidos, estadística, biofísica, siempre centrándonos en las aplicaciones. El centro del curso son los clásicos métodos Dinámica Molecular y Monte Carlo. Los estudiantes lograrán al final del mismo reproducir artículos que los utilizan y tendrán herramientas criteriosas para abordar cualquier trabajo donde se necesite aplicarlos.

El curso está pensado para estudiantes de todas las áreas (física, astronomía, matemática, química, computación, ingenierías) que quieran tener conocimientos de técnicas básicas de física computacional, y aprender a implementarlas. Tiene como requisitos tener conocimientos básicos de Mecánica Estadística y el manejo de algún lenguaje de programación ya que desde el primer laboratorio se comenzará programando. El lenguaje que elijan no es lo crucial, sino la Física Computacional y la calidad de sus programas. Simularán todo problema desde scratch y controlando todas las fuentes de error, para lograr contribuciones científicas de calidad.

#### 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.

EX-2025-00111784- -UNC-ME#FAMAF

### - 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, 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.

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- 1- Landau y Paez, Computational Physics. Ed. 2010 & Computational Physics 4th Ed. 2024 by Rubin H Landau, Manuel J Paez & Cristian Bordeianu.
- 2-Frenkel and Smith, Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications, 3ra ed., Academic Press, 2023.
- 3- Allen and Tildesley, Computer simulations of liquids, 2da ed., Oxford University Press, 2017.
- 4- K.Binder y D.W.Heermann, MonteCarlo Simulation in Statistical Physics: an introduction. 6ta. Ed. Springer, 2019.
- 5-Strogatz, Nonlinear Dynamics and Chaos: with Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering, 3ra Ed., CRC Press, 2024.
- 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/as profesores/as 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/las alumnos/as.

### Examen Final

Los/las alumnos/as regulares resolverán un problema numérico complementario, 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/as 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 las unidades.

## REGULARIDAD

EX-2025-00111784- -UNC-ME#FAMAF

Haber entregado y aprobado en termino las guías de problemas.

### **PROMOCIÓN**

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

<b>CORRELATIVIDADES</b>
-------------------------

Licenciatura en Física:

Para cursar: Regularizada Métodos Numéricos.

Para rendir: Aprobada Métodos Numéricos.

Licenciatura en Astronomía:

Para cursar: Regularizada Astronomía de Posición y Métodos Numéricos

Para rendir: Aprobada Astronomía de Posición y Métodos Numéricos

Licenciatura en Matemática:

Para cursar tener aprobada: Funciones Reales, Topología General, Estructuras Algebraicas, Funciones Analíticas, An. Numérico II, Geometría Diferencial, Física General.

Para rendir tener aprobada: Funciones Reales, Geometría Superior, Topología General, Estructuras Algebraicas, Funciones Analíticas, An. Numérico II, Geometría Diferencial, Física General.