



UNIVERSIDAD SIMON BOLIVAR

DIVISION: Física y Matemáticas
DEPARTAMENTO: Física
ASIGNATURA: FS6875 – Tópicos Seleccionados de la Física Computacional
PRE-REQUISITO:
HORAS/SEMANAS:
VIGENCIA: Abril 2004

CONTENIDOS:

INTRODUCCIÓN

El curso tiene como intención cubrir algunos de los métodos y técnicas más importantes en Física Computacional. El total de horas de clases sería de 66, esto es, 6 horas semanales durante las primeras 11 semanas del trimestre.

Reservando la semana 12 para la entrega y presentación de proyectos finales. La evaluación del curso se efectuara en base a tareas y al proyecto final.

1. ELEMENTOS DE C PARA CALCULO CIENTÍFICO (10 HORAS.)

Herramienta Make para la compilación de códigos. Manejo dinámico de memoria. Uso de códigos comerciales y enlace con bibliotecas. Optimización de códigos: profiling.

2. DINÁMICA MOLECULAR. (16 HORAS.)

Métodos de Integración y Conservación de Cantidades. Teoría Cinética. Discos Blandos. Discos Duros.

3. MÉTODO DE MONTE CARLO (16 HORAS.)

Nociones sobre Probabilidad y Muestreo. Integración: Estimación de Áreas y Volúmenes. Simulación en Mecánica Estadística. Modelo de Sing.

4. ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES (12 HORAS.)

Esquemas en Diferencias. Ecuaciones Hiperbólicas: Ondas. Ecuaciones Parabólicas: Difusión de Calor. Ecuaciones Elípticas y Método de Relajación: Potencial Electroestático

5. FLUIDOS EN MEDIOS POROSOS. (12 HORAS.)

Autómata Celular. Gas Reticular

REFERENCIAS:

- H. Gould and J. Tobochnik, “An Introduction to Computer Simulation Methods”, Addison-Wesley (1996).
- P. K. MacKeown and D. J. Newman, “Computational Techniques in Physics”, Adam Hilger (1987).
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, “Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing”, Cambridge University Press (1997).
- B. Carnahan, H. A. Luther and J. O. Wilkes, “Applied Numerical Methods”, John Wiley & Sons (1970).
- E. W. Schmid, G. Spitz and W. L. osch, “Theoretical Physics on the Personal Computer”, second edition, Springer-Verlag (1990).
- P. R. Bevington, “Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences”, McGraw-Hill (1969).
- D. W. Heermann, “Computer Simulation Methods in Theoretical Physics”, second edition, Springer-Verlag (1990).
- J. M. Haile, “Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods”, John Wiley & Sons (1997).
- D. C. Rapaport, “The Art of Molecular Dynamics Simulations”, Cambridge University Press (1995).
- M. E. J. Newman and G. T. Barkema, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics”, Oxford University Press (1999)