

Física Computacional

- Número de créditos: 10
 - Semestre recomendado: 1
 - Horas a la semana: 10
 - Teoría: 6
 - Práctica: 4
 - Autoestudio: 6
 - Requisitos: Ninguno
 - Clave: AFB-3
 - Asignatura: Básica
 - Materia asociada a la Línea de investigación: OF, MCyER, MM
-

Descripción de la asignatura: La mayoría de los problemas en Física y en la Física aplicada son imposibles de resolverse de forma analítica. La Física Computacional y Modelado es una alternativa para resolver problemas de forma numérica y por simulación. Los métodos numéricos se basan principalmente en el formalismo matemático para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas y ecuaciones diferenciales tanto ordinarias como parciales, las cuales están presentes en las leyes y los principios fundamentales de la Física. Mientras que la simulación se basa en la teoría de la mecánica estadística. En esta última, se requiere del modelado para describir tanto la forma como el potencial de interacción de las moléculas que conforman el sistema de estudio.

Contenido:

- Cálculo Numérico
- Ecuaciones diferenciales ordinarias
- Métodos numéricos para matrices
- Ecuaciones diferenciales parciales
- Simulación de Dinámica molecular
- Modelado de sistemas continuos

Índice temático:

1. **Cálculo numérico:** Diferenciación numérica. Integración numérica. Raíces de una ecuación. Extremos de una función. Dispersión Clásica.

2. **Ecuaciones diferenciales ordinarias.** Problemas de valor inicial. Métodos de Euler y Picard. Métodos Predictor-Corrector. Método de Runge-Kutta. Problemas de eigenvalores y valores a la frontera. El método de disparo.
3. **Métodos Numéricos para matrices.** Matrices en Física-Matemática. Operaciones básicas de matrices. Sistemas de ecuaciones lineales. Ceros y extremos de funciones multivariantes. Problemas de eigenvalores. Método de Faddeev-Leverrier. Ceros complejos de un polinomio. Estructura electrónica de átomos. Algoritmo de Lanczos y el problema de muchos cuerpos. Matrices aleatorias. Análisis espectral. Análisis de Fourier y funciones ortogonales. Transformada de Fourier Discreta. Transformada rápida de Fourier. Transformada de Fourier en varias dimensiones. Análisis de paquete de onda. Transformada de un paquete de onda discreta. Funciones especiales. Cuadraturas Gaussianas.
4. **Ecuaciones diferenciales parciales.** Ecuaciones diferenciales parciales en física. Separación de variables. Discretización de una ecuación. El método de matrices para ecuaciones diferenciales. El método de relajación. Problemas de valores iniciales.
5. **Simulaciones de Dinámica Molecular.** Comportamiento general de un sistema clásico. Métodos Básicos para sistemas de muchos cuerpos. El algoritmo de Verlet. Estructura de clusters atómicos. El método de Gear predictor-corrector. Presión constante, temperatura y longitud de enlace. Estructura y dinámica de materiales reales. Dinámica molecular AB initio.
6. **Modelado de sistemas continuos.** Ecuaciones hidrodinámicas. El método básico de elemento finito. El método variacional de Ritz. Sistemas de dimensión superior. El método de elemento finito para ecuaciones no lineales. El método de partícula en celda. Hidrodinámica y Magnetohidrodinámica. El método de lattice Boltzmann.

Bibliografía:

- Tao Pang. "An introduction to Computational Physics", Cambridge Publishing, 2006.
- S. S. M. Wong, "Computational Methods in Physics and Engineering", World Scientific, 1997.

