

# SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN FÍSICA

**Correlativas:** Mecánica Estadística I

Se dicta en el segundo cuatrimestre de cada año.

**Conocimientos Sugeridos:** Conocimientos básicos de programación y cálculo numérico para cursar esta materia, se sugiere tomar previamente una asignatura que incluya estos contenidos como, por ejemplo, la materia "Computación" que se dicta en este departamento.

## Fundamentación:

Tradicionalmente el campo de trabajo de los físicos se ha dividido en experimental y teórico. A partir de la aparición de las computadoras y de su progresiva eficiencia se fue consolidando un nuevo abordaje a los problemas físicos a partir de la simulación computacional. Este abordaje permite la resolución de modelos teóricos de gran complejidad (cuya resolución analítica no se conoce) con un nivel de precisión comparable o por debajo muchas veces del error experimental. Así, la simulación computacional, se ha convertido en un área de trabajo de gran actividad para los físicos y juega un rol importante a la hora de vincular los otros campos de trabajo en la disciplina y facilitar la interacción y cooperación. Por estas razones, consideramos de importancia la inclusión de una materia a nivel de grado donde los alumnos puedan enterarse de las posibilidades y alcances de esta área de trabajo, ya sea porque van a utilizar sus herramientas o a colaborar con expertos del campo.

Por otra parte, las simulaciones computacionales en mecánica estadística tienen un gran valor formativo a nivel grado ya que permiten visualizar la conexión entre las leyes de la mecánica estadística y la termodinámica. Con relativa facilidad se pueden montar "experimentos" numéricos a través de los cuales explorar la conexión entre las leyes del mundo microscópico y macroscópico.

Por las razones expuestas, el siguiente programa es de contenidos generales pero pone énfasis en la mecánica estadística.

## Programa:

**Unidad 1:** Introducción a las simulaciones computacionales.

**1.1** Rol que juegan las simulaciones computacionales en la investigación científica, en particular: en la investigación en física. Ejemplos.

**1.2** Repaso de elementos básicos de programación y cálculo numérico (integración, interpolación, diagonalización, etc.). Aplicaciones a problemas físicos, por ejemplo: resolución de la ecuación de Schrödinger en una dimensión para un potencial arbitrario.

**Unidad 2:** Simulaciones Computacionales en Mecánica Estadística.

**2.1** Repaso de conceptos centrales de la mecánica estadística. Visiones de Gibbs y Boltzmann. Ergodicidad. Equilibrio. Fluctuaciones.

**2.2** Simulaciones de Dinámica Molecular

Introducción: Sólidos, líquidos, gases. Uso de potenciales. Objetivos de una simulación.

Algoritmos para resolver las ecuaciones de Newton. Preparación de una simulación: Condiciones iniciales y condiciones de contorno. Ensamblados NVE, NVT, NpT.

Propiedades que se pueden obtener en una simulación. Variables de estado termodinámicas, propiedades estructurales, funciones de correlación estáticas: factor de estructura, función de correlación de pares,

funciones de correlación temporales y coeficientes de transporte: difusividad, viscosidad. Ejemplos y aplicaciones. Transición de fase sólido-líquido.

### **2.3 Método de Montecarlo**

Muestreo Simple. Muestreo pesado. Cadenas de Markov. Balance detallado. Algoritmo de Metrópolis. Ejemplos y aplicaciones: Simulación de un sistema de espines en una red bidimensional. Modelo de Ising. Transición de fase de 2do orden.

**Unidad 3:** Introducción a la simulación de la dinámica de sistemas fuera del equilibrio y procesos estocásticos.

**3.1** Simulaciones estocásticas. Ecuación maestra. Algoritmos de simulación estocástica. Aplicaciones a sistemas dinámicos. Caminata aleatoria.

**Unidad 4:** La simulación computacional en la investigación en física. Esta unidad dependerá del docente a cargo.

## **Bibliografía:**

"Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing". (Cambridge University Press, 2007)

M.E. M.P. Allen and D.J. Tildesley. "Computer Simulation of liquids". (Oxford University Press, New York, 1987).

D.Frenkel and B. Smit. "Understanding Molecular Simulation, from Algorithms to applications". (Academic Press, San Diego, 1996).

J. Newman and G.T. Barkema. "Montecarlo Methods in Statistical Physics". (Oxford University Press, New York, 1999)

C. W. Gardiner. "Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences" (Springer, Berlín, 1985)