

“Simulaciones Computacionales en Física”

Programa de la materia – Curso 2022

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.

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. Ensembles 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. Caminata aleatoria.

3.2 Introducción a sistemas dinámicos. Resolución numérica de ecuaciones no lineales. Efectos estocásticos. Aplicaciones a problemas biológicos.

Unidad 4: La simulación computacional en la investigación científica.

4.1 Métodos de primeros principios (*ab-initio*) y su utilización en el cálculo de la densidad electrónica de sólidos periódicos. Determinación de estructuras de menor energía, frecuencias de vibración, relajaciones estructurales introducidas por impurezas, gradientes de campo eléctrico. Simulaciones de dinámica Molecular *ab-initio*.

4.2 Simulaciones en sistemas vítreos. Sistemas que no equilibran por debajo de una dada temperatura. Herramientas para caracterizar la transición.

4.3 Simulación de la transmisión de enfermedades infecciosas: un problema interdisciplinario. a) Lo que los modelos pueden y no-pueden hacer. b) Modelos deterministas. c) Modelos estocásticos. Aplicación al problema de la epidemia de COVID-19 en Argentina en 2020.

NOTA: Los trabajos prácticos de la Unidad 4 serán de realización *opcional*.

Régimen de cursada:

- Clases teóricas (3 horas semanales) y de trabajos prácticos (de 3 horas semanales).
- Aprobación de los trabajos prácticos: se presentará la resolución de determinados ejercicios de las prácticas del curso.
- Aprobación de la materia. Opción 1) Se realizará un trabajo final que incluirá la aplicación de herramientas vistas en el curso al estudio de un problema. El estudio puede involucrar, el desarrollo de un programa computacional o la utilización de uno existente, en el caso de un programa muy complejo como los utilizados para dinámica molecular o cálculos *ab-initio*. Opción 2) Se rendirá examen final sobre los temas abordados en el curso.

Para más información:

consultar con el profesor a cargo: fabricius@fisica.unlp.edu.ar

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)