

Métodos computacionales para la física estadística

Semestre 2011-2

Dr. David P. Sanders

Cubículo #414, 4o. piso, Departamento de Física

dps@fciencias.unam.mx

Objetivos:

- Aprender a analizar problemas físicos y resolverlos con simulaciones computacionales
- Aprender a procesar y analizar datos
- Aprender métodos modernos de programación, incluyendo la programación orientada a objetos y la programación genérica, utilizando C++
- Enfocarse en los métodos computacionales para la física estadística, de tipo Monte Carlo

Temario

1. Introducción

- Elementos básicos de C++
- Números aleatorios
- Caminatas aleatorias
- Análisis de datos estadísticos

2. Métodos tipo Monte Carlo

- Reseña de física estadística: ensamble canónico
- Métodos tipo Monte Carlo básicos: integración numérica
- Métodos tipo Monte Carlo con cadenas de Markov
- Modelo de Ising: algoritmo de Metropolis
- Visualización mediante gnuplot y OpenGL
- Modelo de Potts
- Automatización de corridas de programas con bash y awk

3. “Lattice gases” (gases sobre redes)

- Equivalencia con modelo de Ising
- Simulaciones en ensamble gran canónico
- Metaestabilidad
- Ensamble canónico: dinámica de Kawasaki de intercambio de espines
- Programación orientada a objetos con C++

4. Localización de transiciones de fase

- Cumulante de Binder
- Escalamiento de tamaño finito

5. Sistemas continuos

- Esferas duras

- Fluidos con interacciones tipo Lennard-Jones
- Ensamblados adicionales

6. Métodos avanzados

- Algoritmo de cúmulos de Wolff
- Simulaciones eficientes: “N-fold way” (cadenas de Markov absorbentes)

7. Ensamblados generalizados

- Muestreo entrópico
- Algoritmo de Wang–Landau

8. Sistemas fuera de equilibrio: Monte Carlo dinámico

- Metaestabilidad
- Crecimiento de dominios
- Transiciones de fase fuera de equilibrio

Bibliografía

- MEJ Newman & GT Barkema
***Monte Carlo Methods in Statistical Physics*
(Oxford University Press, 1999)
- DP Landau & K Binder
A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics
(Cambridge University Press, 2000)
- D Frenkel & B Smit
Understanding Molecular Simulation
(Academic Press, 2002; 2da edición)
- M Allen & D Tildesley
Computer Simulation of Liquids
(Oxford University Press, 1987)