

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FAULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: de Física

ASIGNATURA: FISICA ESTADISTICA COMPUTACIONAL

CARRERA/S: Doctorado

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA : 1(un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE:	a) Teóricas..... ⁴	hs.	b) Trab.Prácticos..... ⁵	hs.
	c) Laboratorio.....	hs.	d) Seminario.....	hs.
			e) Totales..... ⁹	hs.

- 1) Introducción a la física estadística computacional.
 - 1.i) conceptos de la mecánica estadística de equilibrio relevantes para simulaciones.
 - 1.ii) conceptos de la mecánica estadística de no equilibrio relevantes para simulaciones.
- 2) Métodos estocásticos
 - 2.i) Integración por Monte Carlo
 - 2.ii) Números cuasialeatorios. Tests de números aleatorios. Generación de números aleatorios de distribuciones dadas.
 - 2.iii) Reducción de la varianza- muestreo de importancia - muestreo correlacionado - muestreo estratificado.
 2. iv) Cadenas Markov - Definiciones - Clasificación o estados - Clasificación de cadenas - Cálculo de p^n - Ejemplos.
 2. v) Dinámica Browniana
 2. vi) Métodos de Monte Carlo - Ley de los grandes números - Ley fuerte de los grandes números.
 2. vi. 1) Ensemble Microcanónico
 2. vi. 2) Ensemble Canónico - Análisis de de Metropolis
 2. vi. 3) Ensemble Isobárico-isotérmico
 2. vi. 4) Ensemble Gran Canónico
 2. vi. 5) Aplicación a problemas físicos relevantes (sistemas de carozo duro y potenciales discontinuos - sistemas con potenciales blandos de rango corto - potencial de Lennard Jones - potenciales generalizados en el espacio de fases de un cuerpo, etc.)

embado por Resolución 00156/90 P.D.

3) Métodos dinámicos

3. i) Dinámica Molecular en equilibrio

- 3.i.1.) Métodos de integración numérica
- 3.i.2.) Ensemble microcanónico
- 3.i.3.) Ensemble canónico - renormalización directa - sistema en contacto con un baño
- 3.i.4.) Ensemble Gran Canónico
- 3.i.5.) Cálculo de la energía libre y transiciones de fases - método de incorporación - muestreo de "sombriilla"
- 3.i.6.) Aplicación a problemas físicos relevantes (sistemas finitos gases de Lennard Jones en la zona de metaestabilidad - etc)

3. ii) Dinámica molecular de no equilibrio

- 3.ii.1.) Generalización de las ecuaciones de Newton
- 3.ii.2.) Teoría de control y retroalimentación
- 3.ii.3.) Simulación de flujos difusivos
- 3.ii.4.) Simulación de flujos plásticos y viscosos
- 3.ii.5.) Aplicación a problemas físicos relevantes

3. iii) Ecuaciones de Cinéticas

- 3.iii. 0) Ecuaciones cinéticas - jerarquía BBGKY - Ecuación de Vlasov - Ecuación de Boltzmann clásica y cuántica
- 3.iii. 1) Método de los ensembles paralelos
- 3.iii.2.) Método de las partículas de test
- 3.iii. 3) Aplicación a colisiones nucleares

BIBLIOGRAFIA

a) Mecánica Estadística

- 1) D.A. McQuarrie, "Statistical Mechanics"; Harper & Row 1976
- 2) R. Balescu, "Equilibrium and Non-equilibrium Statistical Mechanics" John Wiley & Sons 1975.

b) Fenómenos estocásticos

- 1) D. R. Cox & H. D. Miller "The Theory of Stochastic Processes"; Chapman & Hall 1978.
- 2) N.T.J. Bailey "The Elements of stochastic Processes"; John Wiley & Sons 1965.

c) Específicos

- 1) F.F. Abraham, "Computational Statistical Mechanics. Methodology, applications and supercomputing" ; Advances in Physics Vol. 35 No 1 1-111.
- 2) K. Binder (ed.) "Monte Carlo Methods" Topics in Current Physics, vol 7 ; Springer-Verlag 1978.
- 3) D.W. Heerman "Computer Simulation Methods in theoretical Physics", Springer Verlag 1966.

p. 2

- 4) S. Koonin " Computational Physics" ; Benjamin 1986.
- 5) M. Kalos "Monte Carlo Methods in Quantum Mechanics", Benjamin 1987 .
- 6) G. Ciccotti, D. Frenkel & I. McDonald (eds) "Simulation of Liquids and Solids"; North-Holland 1987.

Firma del Profesor:



Aclaración de Firma: Dr. Claudio O. Dorso

Firma del Director:



Dr. GUILLERMO DUSSEL
DIRECTOR INTERINO
DEPARTAMENTO DE FISICA

- 8 MAYO 1990