

# Simulaciones computacionales

## Programa tentativo

Prof. Tomás S. Grigera

1. **Introducción.** Introducción a las simulaciones. Algunas técnicas. Introducción a Monte Carlo: cálculo de  $\pi$  por muestreo directo y por cadena de Markov. Experimento de Bouffon. Algoritmo de Metropolis y Metropolis-Hasting.
2. **Mecánica estadística y números aleatorios.** Ecuación maestra y su solución estacionaria. Equilibrio: distribución de Boltzmann, energía más probable y entropía microcanónica. Susceptibilidad ante un campo no uniforme. Función de correlación y correlación de fluctuaciones (correlación conectada). Relación de fluctuación-disipación estática. Longitud de correlación. Función de correlación temporal, tiempo de relajación. Números pseudoaleatorios. Generadores con distribución uniforme y métodos de muestreo de distribuciones no uniformes: métodos del rechazo, de la torre, de transformación y mixto.
3. **Monte Carlo en el retículo y modelo de Ising.** Monte Carlo estático y dinámico. Muestreo sopesado. Monte Carlo por cadena de Markov (dinámico): matriz de transiciones, condición de balance, condiciones para la unicidad de la distribución estacionaria. Reversibilidad temporal y balance detallado. Tiempos de relajación y autovalores de la matriz de transición. Modelo de Ising. Implementación de una simulación Monte Carlo del modelo de Ising. Errores. Estimación de media y varianza. Métodos de bloques, bootstrap y jackknife.
4. **Correlaciones espaciales y tamaño finito.** Correlación espacial: estimación, longitud de correlación. Escaleo de tamaño finito para el caso de la susceptibilidad. Corrimiento de la temperatura crítica. Cumulantes de Binder.
5. **Correlaciones temporales y ralentamiento crítico.** Correlaciones temporales. Procesos estacionarios de primer y segundo orden. Envejecimiento físico. Estimación numérica de correlaciones temporales. Propiedades del estimador. Sesgo y raíz del estimador conectado. Estimación con muestras finitas. Ralentamiento crítico y escaleo dinámico. Algoritmos de cluster: algoritmo de Wolff.
6. **Monte Carlo en el continuo.** Algoritmo de Metropolis con movidas locales para un sistema clásico con potenciales de a pares. Cálculo de la energía: radio de corte, búsqueda de pares cercanos. Monte Carlo isotérmico-isobárico. Monte Carlo gran canónico. Gas de red y mapeo al modelo de Ising. Dinámica de Kawasaki (gas de red canónico o Ising con parámetro de orden conservado): separación de fases. Gran canónico en el continuo.
7. **Otros algoritmos de Monte Carlo.** Monte Carlo cinético o de tiempo continuo. Probabilidades de transición y tiempo medio de permanencia en un estado, algoritmo de MC cinético. Muestreo entrópico: evaluación de entropía, energía libre, energía y otros observables. Cálculo de la densidad de estados: algoritmo de Wang-Landau.
8. **Dinámica Molecular.** Elementos Básicos de Dinamica Molecular. Algoritmos de integración numérica (leap-frog, Verlet). Aplicaciones y ejemplos.

## Bibliografía

- Allen M.P. y Tildesley D.J. (1987), *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford.
- Krauth W. (2006), *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*, Oxford Master Series in Statistical, Computational and Theoretical Physics, Oxford University Press, Oxford, first ed.

- Newman M.E.J. y Barkema G. (1999), *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, Oxford.
- Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A. y Vetterling W.T. (1992), *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Second Edition*, Cambridge University Press, Cambridge ; New York, 2 edition ed.
- Rapaport D.C. (2004), *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, second ed.
- Schmidt V. (2010), Markov chains and Monte Carlo simulation (lecture notes).
- Sokal A.D. (1997), Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and new algorithms, de C. DeWitt-Morette, P. Cartier y A. Folacci (compiladores), *Functional Integration: Basics and Applications (1996 Cargèse School)*, Plenum, New York.
- Wang F. y Landau D.P. (2001), Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050–2053.