

Introducción a las Simulaciones Computacionales

Profesores: Alvaro Nuñez /Rodrigo Soto/ Mario Riquelme
Departamento de Física
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Chile

Este curso presenta, en una metodología de trabajo en proyectos y clases teóricas, los elementos fundamentales de las simulaciones computacionales en física. El curso se divide en tres capítulos que serán cubiertos por cada uno de los profesores. En cada una de esas partes los alumnos desarrollarán un proyecto que se irá haciendo por tareas semanales.

Capítulo 1: Método Monte Carlo

- Números aleatorios
- Procesos estocásticos
- Método de Montecarlo en mecánica estadística
- Algoritmo de Metropolis
- El modelo de Ising en 2D: comparación con resultado exacto
- Montecarlo cuántico: path integral quantum Montecarlo
- Modelo de Ising cuántico en 1D
- **Proyecto: Sistema de bosones 1D**

Capítulo 2: Dinámica molecular

- Ecuaciones de movimiento de sistemas de muchos cuerpos
- Modelos moleculares: Lennard-Jones, esferas duras y esferas blandas. Manejo de vecinos
- Integradores
- Ensembles termodinámicos y termostatos
- Mediciones, promedios y errores
- Fuerzas de largo alcance y suma de Ewald
- **Proyecto: Medición de la viscosidad en un fluido Lennard-Jones**

Capítulo 3: Simulaciones de N cuerpos

- Introducción
- Métodos:
 - Directo: tipo partícula-partícula (PP)
 - Tipo árbol: método de Barnes y Hut
 - Tipo partícula-malla (PM)
- Aplicaciones: plasmas y sistemas gravitantes
- **Proyecto: Estudio de la inestabilidad de Weibel en plasmas astrofísicos**

Referencias:

- "Numerical Methods in Astrophysics: An Introduction" Bodenheimer, P., Laughlin, G. P., Rozyczka, M., y Yorke, H. W.
- "Plasma Physics via Computer Simulation" Birdsall, C. K. y Langdon, A. B.
- "Computer Simulation Using Particles" Hockney, R. W. y Eastwood, J. W.
- "Computer Simulations of Liquids" M.P. Allen and D.J. Tildesley
- "Understanding Molecular Simulations. From Algorithms to Applications" D. Frenkel and B. Smit