

Simulation methods in statistical physics

Titulaire

Bortolo Matteo MOGNETTI (Coordonnateur)

Mnémonique du cours

PHYS-F481

Crédits ECTS

5 crédits

Langue(s) d'enseignement

Anglais

Période du cours

Deuxième quadrimestre

Campus

Plaine

Contenu du cours

La méthode de Monte-Carlo statique

- > générateurs de nombres aléatoires
- > échantillonnage de variables aléatoires

La méthode de Monte-Carlo dynamique

- > chaînes de Markov
- > ergodicité et bilan (super) détaillé
- > modèles génératifs
- > analyse des données

Les phénomènes critiques

- > analyse en taille finie
- > chemins auto-évitant

Les ensembles statistiques d'équilibre

- > simulations dans l'ensemble microcanonique
- > simulations dans l'ensemble canonique
- > simulations dans l'ensemble grand-canonique
- > simulations dans l'ensemble isobare-isotherme
- > simulations dans l'ensemble de Gibbs
- > échantillonnages biaisés,
- > calcul d'énergies libres, densité d'états

Dynamique Moléculaire

- > intégrateurs symplectiques
- > thermostat de Nosé-Hoover

Objectifs (et/ou acquis d'apprentissages spécifiques)

Le cours traitera des principales techniques de simulation (en particulier la méthode de Monte-Carlo) qui sont utilisées dans le domaine de la Mécanique Statistique. Le but du cours est de comprendre comment créer des algorithmes pour échantillonner efficacement des distributions de probabilités.

Méthodes d'enseignement et activités d'apprentissages

Méthode d'enseignement : enseignement présentiel

Activités d'apprentissage : cours magistral, exercices dirigés (à l'ordinateur), travaux personnels

Contribution au profil d'enseignement

1.4 Conceptualiser des principes complexes et les modéliser.

1.3. Maîtriser les outils mathématiques et/ou technologiques et expérimentaux de la physique.

1.2. Comprendre les lois de la nature au travers de leur formalisation en mécanique classique et quantique, électromagnétisme, théorie quantique des champs, relativité restreinte et générale, thermodynamique, physique statistique...

Références, bibliographie et lectures recommandées

D. E. Knuth, *The art of computer programming* (chapter 3), Addison Wesley

A. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*. In: DeWitt-Morette C., Cartier P., Folacci A. (eds) *Functional Integration*.

D. Frenkel and B. Smit *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, Elsevier

D. P. Landau and K. Binder *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge university press

Autres renseignements

Lieu(x) d'enseignement

Plaine

Contact(s)

Bortolo.Matteo.Mognetti@ulb.be

Méthode(s) d'évaluation

Autre

Méthode(s) d'évaluation (complément)

A Épreuve orale

B Presentation d'un article scientifique pertinent

Construction de la note (en ce compris, la pondération des notes partielles)

A 70%

B 30%

Langue(s) d'évaluation principale(s)

Français et Anglais

Programmes

Programmes proposant ce cours à la faculté des Sciences

MA-PHYS | **Master en sciences physiques** | finalité Approfondie/
bloc 1 et finalité Didactique/bloc 1

