

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

Curso académico: 2017-2018

Identificación y características de la asignatura			
Código	401922	Créditos ECTS	6
Denominación (español)	Física Estadística Computacional		
Denominación (inglés)	Computational statistical Physics		
Titulaciones	Máster Universitario en Simulación en Ciencias e Ingeniería		
Centro	Escuela de Ingenierías Industriales		
Semestre	1	Carácter	Optativa
Módulo	Optativas		
Materia	Simulación en Ciencias		
Profesor/es			
Nombre	Despacho	Correo-e	Página web
Juan Jesús Ruiz Lorenzo	Depto Física B.202	ruiz@unex.es	www.eweb.unex.es/eweb/fisteor/juan/
Francisco Vega Reyes	Depto Física A006	fvega@unex.es	www.unex.es/eweb/fisteor/fran/
Área de conocimiento	Física Teórica		
Departamento	Física		
Profesor coordinador (si hay más de uno)	Francisco Vega Reyes		
Competencias (ver tabla en https://goo.gl/BjxjVH)			
asCompetencias	n una "X" Marcar	esCompetencias	n una "X" Marcar
CB6	X	CG1	X
CB7	X	CG2	X
CB8	X	CG3	X
CB9	X	CG4	X
CB10	X	CG5	X
		CG6	X
		CG7	X
			CT1
			CT2
			CT3
			CT4
			CT5
			CT6
			CT7
			CT8
			CT9
			CT10
			CE1
			CE2
			CE3
			CE4
			CE5
			CE6
			CE7
			CE8
			CE9
			CE10
Contenidos			

Breve descripción del contenido

Algoritmos basados en el método de Monte Carlo para simulaciones en Física Estadística. Algoritmos de Metrópolis y baño caliente. Métodos de clusters. Métodos para modelos vectoriales. Simulaciones por dinámica molecular. Método Híbrido-Monte-Carlo. Dinámica Molecular en diferentes colectivos: Dinámica Molecular a temperatura y presión constantes.

Temario de la asignatura

Denominación del tema 1: **Simulaciones de Monte Carlo.** (10 horas)

Contenidos del tema 1:

- 1.1 Introducción a la Física Estadística de los Modelos magnéticos.
- 1.2 Métodos estáticos de Monte Carlo.
- 1.3 Métodos dinámicos de Monte Carlo.
- 1.4 Métodos para el Modelo de Ising.
- 1.5 Métodos para modelos vectoriales.
- 1.6 Métodos de clusters.
- 1.7 Aplicaciones.

Prácticas: Simular el modelo de Ising en una y dos dimensiones. Programar el modelo de Ising en 3 dimensiones usando métodos de clusters. Programar el modelo de Heisenberg usando Baño Caliente y métodos de clusters. (10 horas)

Denominación del tema 2: **Análisis de datos.** (4 horas)

Contenidos del tema 2:

- 2.1 Consideraciones generales.
- 2.2 Tiempos de autocorrelación.
- 2.3 Cálculo de errores: el método de Jack-Knife y bootstrap.
- 2.4 Método de la densidad espectral.
- 2.5 Algunas aplicaciones.

Práctica: Calcular tiempos de autocorrelación exponenciales e integrados para diferentes observables: Scaling. Caracterizar la transición de fase en los modelos de Ising y Heisenberg en tres dimensiones. (5 horas).

Denominación del tema 3: **Simulaciones de dinámica molecular** (14 horas)

Contenidos del tema 3:

- 3.1 Fundamentos de Python y C. Representación gráfica, tratamiento estadístico, librerías de optimización.
- 3.2 Fundamentos de Materia Condensada y Física Estadística relacionados con la dinámica molecular.
- 3.3 Dinámica molecular de partículas blandas: potenciales de interacción.
- 3.4 Dinámica molecular de partículas duras: algoritmos de ordenamiento y selección de listas de números (quicksort, heapsort, mergesort y timsort).
- 3.5 Partículas macroscópicas: dinámica granular.

- 3.6 Caracterización de la estructura: función de distribución radial, parámetros de orden, orden orientacional. Triangulación de Delaunay y diagramas de Voronoi. Rupturas de simetría.
- 3.7 Caracterización de la dinámica: Estado microscópico: función de distribución y propiedades de la misma. Estado macroscópico: cálculo de campos promedio (temperatura, densidad, flujos de momentos, etc.) y propiedades de transporte (difusión, viscosidad, conductividad térmica, etc.).
- 3.8 Método Híbrido-Monte Carlo.

Prácticas:

1. Elaboración de algoritmo de discos blandos. (4 horas)
2. Elaboración de algoritmo de partículas duras. (6 horas)
3. Detección y caracterización de cambios estructurales y rupturas de simetría en sistemas 2D: close random packing (inicialización de un sistema denso), fase gaseosa, líquida, y hexática en discos elásticos e inelásticos. (5 horas)

Actividades formativas

Horas de trabajo del alumno por tema		Presencial					No presencial
Tema/Evaluación	Total	GG	S	O	L	TP	EP
1	40	10		10			20
2	29	4		5			20
3	49	14		15			20
Evaluación del conjunto	2	2					30
Total	150	30		30			90

GG: Grupo Grande (100 estudiantes).

S: Seminario (clases de problemas, seminarios, casos prácticos = 40 estudiantes).

O: Ordenador (prácticas en sala de ordenadores = 30 estudiantes).

L: Laboratorio (prácticas de laboratorio o de campo = 15 estudiantes).

TP: Tutorías programadas (seguimiento docente tipo tutorías ECTS).

EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo y lectura de bibliografía.

Metodologías docentes

De entre las metodologías docentes incluidas en el plan de estudios del título, en la presente asignatura se utilizan las siguientes:

Metodologías docentes	Se indican con una "X" las utilizadas
1. Clase magistral. Exposición de contenidos por parte del profesor.	X
2. Sesiones de trabajo utilizando metodología del caso.	X
3. Sesiones de trabajo en el aula para la resolución de ejercicios.	X
4. Desarrollo de prácticas en espacios con equipamiento especializado (laboratorios, aulas de informática, trabajo de campo).	X
5. Visitas técnicas a instalaciones.	
6. Desarrollo, redacción y análisis, individualmente o en	X

grupo, de trabajos, memorias, ejercicios, problemas, y estudios de caso, sobre contenidos y técnicas, teóricos y prácticos, relacionados con la materia.	
7. Pruebas, exámenes, defensas de trabajos, prácticas, etc. Pudiendo ser orales o escritas e individuales o en grupo.	X
8. Estudio del alumno. Preparación y análisis individual de textos, casos, problemas, etc.	X
9. Desarrollo de habilidades comunicativas (orales, escritas, multimedia).	X
10. Aprendizaje fuera del aula, basado en la vinculación entre formación académica y experiencias empresariales o profesionales.	
11. Aprendizaje supervisado y tutelado por el profesor para, a través de la interacción individual entre alumno y tutor, detectar posibles problemas del proceso formativo, conocer los resultados del aprendizaje fuera del escenario del aula y programar los procesos de trabajo del alumno en actividades no presenciales como memorias, trabajo fin de master, preparación de la defensa del mismo, etc.	

En las clases de **grupo grande** se explicarán los fundamentos teóricos de los conceptos presentados en la asignatura.

En las **prácticas de ordenador** se explicarán las herramientas básicas de programación de los algoritmos presentados en las clases de grupo grande y se explicarán programas ejemplo para que los alumnos puedan tener una base a partir de la cual desarrollar sus propios programas y aplicarlos a casos reales concretos que les serán propuesto.

Los **proyectos tutorizados** consistirán en la resolución mediante alguna de las herramientas explicadas en la asignatura de un problema real de entidad superior a los estudiados en las prácticas de ordenador.

Resultados de aprendizaje

Conocer y ser capaz de implementar simulaciones numéricas en Física Estadística para el estudio y la resolución de problemas concretos de los ámbitos de las Ciencias.

Sistemas de evaluación

Criterios de evaluación

Se evaluará la asignatura de acuerdo a los siguiente criterios:

CE1. Dominio de los contenidos teóricos de la asignatura.

Relacionado con las competencias CB6, CB7, CB8, CB10, CG1, CG4, CG5, CT1, CT4, CT7, CEO4, CE08, CE09.

CE2. Capacidad para aplicar los conocimientos teóricos adquiridos a la resolución de problemas reales.

Relacionado con las competencias CB6, CB7, CB8, CG2, CG3, CG4, CG5, CG6, CG7, CT1, CT2, CT4, CT5, CT6, CT7, CT8, CEO4, CEO8, CE09.

CE3. Dominio de las herramientas informáticas relacionadas con la materia.

Relacionado con las competencias CG2, CG3, CG6, CG7, CT5, CT6,

CEO4,CE07,CE09.

CE4. Capacidad para comunicar y transmitir los conocimientos en un lenguaje técnico apropiado, oral y escrito, dentro del campo de la inteligencia artificial. Relacionado con las competencias CB8, CB9, CG4, CG5, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8.

Actividades de evaluación

De entre las actividades de evaluación incluidas en el plan de estudios del título, en la presente asignatura se utilizan las siguientes ponderaciones (en %):

	Rango establecido en la memoria verificada	Convocatoria ordinaria	Convocatoria extraordinaria	Evaluación global ^(*)
1. Exámenes (Examen final y/o Exámenes parciales acumulativos y/o eliminatorios).	40%-70% ⁽¹⁾ 0%-40% ⁽²⁾ 0% ⁽³⁾	20 %	20 %	20 %
2. Resolución y entrega de actividades (casos, problemas, informes, trabajos, proyectos, etc.), individualmente y/o en grupo.	0%-40% ⁽¹⁾ 40%-80% ⁽²⁾ 0% ⁽³⁾	70 %	70 %	80 %
3. Asistencia y aprovechamiento en las clases, prácticas y otras actividades presenciales.	0%-20% ^(1,2) 0%-20% ⁽²⁾ 0% ⁽³⁾	10	10	---
4. Presentación y defensa de trabajos y memorias propuestos.	0% ⁽¹⁾ 0% ⁽²⁾ 100% ⁽³⁾			

(*) El estudiante comunicará al profesor por escrito el tipo de evaluación elegido en las tres primeras semanas de cada semestre y el profesor remitirá la correspondiente relación a la Comisión de Calidad de la Titulación. Cuando un estudiante no realice esta comunicación, se entenderá que opta por la evaluación continua. Una vez elegido el tipo de evaluación, el estudiante no podrá cambiar en la convocatoria ordinaria de ese semestre y se atenderá a la normativa de evaluación para la convocatoria extraordinaria.

⁽¹⁾ Asignaturas de la materia *Fundamentos matemáticos (Métodos numéricos, Ecuaciones diferenciales y Tratamiento estadístico de datos)*.

⁽²⁾ Resto de asignaturas.

⁽³⁾ Trabajo fin de máster.

Descripción de las actividades de evaluación

El alumno desarrollará programas en las clases prácticas cuyos resultados se presentarán en una memoria. La evaluación de esta memoria supondrá un 30 % de la nota de la asignatura. (Recuperable 30%).

El alumno desarrollará uno o varios programas, dependiendo de su extensión y dificultad, donde se resolverán uno o varios casos prácticos mediante las técnicas estudiadas en la asignatura. Se presentará una memoria con los resultados obtenidos. Su evaluación representará el 40% de la nota de la asignatura. (Recuperable 40%).

Se realizará un examen teórico-práctico al final de la asignatura que representará un 20 % de la nota de la asignatura. (Recuperable 20%).

La evaluación global tendrá lugar el mismo día asignado al examen final de

cada convocatoria por la Subdirección de Ordenación Académica de la E.II.II. Constará de las siguientes pruebas:

- Un examen teórico-práctico de la asignatura. Representará el 20% de la nota.
- El alumno deberá presentar una memoria con los resultados obtenidos en la resolución de varios casos prácticos similares a los realizados en las clases prácticas. Representará el 30% de la nota
- El alumno deberá presentar, así mismo, una memoria con los resultados obtenidos en la resolución de uno o varios, dependiendo de su dificultad y extensión, casos prácticos mediante las técnicas estudiadas en la asignatura. Estos casos prácticos serán similares a los propuestos al resto de los alumnos a lo largo del curso. Representará el 50% de la nota.

Estos programas le serán encargados al alumno por el profesor cuando aquél manifieste su deseo de optar por la evaluación global.

Bibliografía

Básica

- D. P. Landau y K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge, New York, 2000).
- D. E. Knuth, *Seminumerical Algorithms*, Vol 2 de "The Art of Computer Programming" (Addison-Wesley, New York 1998).
- A. D. Sokal en *Functional Integrations: Basics and Applications* (1996 Cargese Summer School). C DeWitt-Morette, P. Cartier y A. Folacci eds. (Plenum, New York, 1997).
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes Third Edition*, (Cambridge University Press, 2007).
- D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, (Cambridge University Press, 2007).
- D. E. Knuth, *Sorting and Searching*, Vol 3, 2nd edition, de "The Art of Computer Programming" (Addison-Wesley, New York 1998).
- T. Schwager, T. Pöschel, *Computational Granular Dynamics : Models and Algorithms* (Springer 2005).

Complementaria

- D. J. Amit y V. Martín-Mayor, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapur, 2005).
- P. M. Chaikin & T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, (Cambridge University Press, 2006).

Otros recursos y materiales docentes complementarios

Recursos complementarios irán apareciendo en las webs:
www.unex.es/eweb/fisteor/juan/

www.unex.es/eweb/fisteor/fran/

Horario de tutorías

Tutorías Programadas: El horario y lugar de las tutorías programadas se publicarán, mediante los procedimientos establecidos para ello, en cuanto sean oficialmente determinados por la Dirección del Centro.

Tutorías de libre acceso: El horario y lugar de las tutorías de libre acceso se publicarán, mediante los procedimientos establecidos para ello, en cuanto sean oficialmente aprobados por el Departamento.

Recomendaciones

Se recomienda repasar y actualizar los conocimientos de programación y de Física Estadística adquiridos durante los estudios de grado.