

## PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

**Curso académico: 2022/2023**

| 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  | 2   | Carácter              | Optativa                                |
| Módulo  | Optativas   |                       |   |
| Materia   | Simulación en Ciencias                                      |                       |   |
| Profesor/es   |   |                       |   |
| Nombre  | Despacho  | Correo-e              | Página web                              |
| Juan Jesús Ruiz Lorenzo   | B202<br>Dpto.<br>Física                                     | ruiz@unex.es          | www.eweb.unex.es/<br>eweb/fisteor/juan/ |
| Francisco Vega Reyes  | A006<br>Depto.<br>Física                                    | fvega@unex.es         |   |
| Área de conocimiento  | Física teórica y Física de la materia condensada            |                       |   |
| Departamento  | Física  |                       |   |
| Profesor coordinador (si hay más de uno)  | Juan Jesús Ruiz Lorenzo                                     |                       |   |
| Competencias <sup>1</sup> (ver tabla en <a href="https://goo.gl/BjxiVH">https://goo.gl/BjxiVH</a> ) |   |                       |   |
| <b>asCompetencias</b>   | <b>n una "X"Marcar</b>                                      | <b>esCompetencias</b> | <b>n una "X"Marcar</b>                  |
| CB6   | X   | CG1                   | X                                       |
| CB7   | X   | CG2                   | X                                       |
| CB8   | X   | CG3                   | X                                       |
| CB9   | X   | CG4                   | X                                       |
| CB10  | X   | CG5                   | X                                       |
|   |   | CG6                   | X                                       |
|   |   | CG7                   | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
|   |   |                       | X                                       |
| <b>Contenidos<sup>6</sup></b>   |   |                       |   |
| Breve descripción del contenido*  |   |                       |   |

<sup>1</sup> Deben ajustarse a lo recogido en la memoria verificada del título.

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.

Descripción de las actividades prácticas del tema 1: 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: los métodos de Jack-Knife y Bootstrap.
- 2.4 Método de la densidad espectral.
- 2.5 Algunas aplicaciones.

Descripción de las actividades prácticas del tema 2: 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 Física de la materia condensada y Física estadística. Fundamentos de simulación de dinámica molecular.
- 3.2 Fundamentos de python. Representación gráfica, librerías matemáticas de uso científico.
- 3.3 Tratamiento estadístico. Procesado y suavizado del ruido. Filtros. Convolución y correlación entre listas/matrices de datos.
- 3.3 Algoritmo de dinámica molecular de partículas duras. Ordenamiento y selección de listas de números (quicksort, heapsort, mergesort y timsort).
- 3.4 Caracterización de la estructura: función de distribución radial, parámetros de orden, orden orientacional. Diagramas de Voronoi.

Rupturas de simetría.

- 3.5 Caracterización de la dinámica: Estado microscópico: función de distribución y propiedades de la misma. Estado macroscópico: cálculo de campos pro-medio y propiedades de transporte (difusión, viscosidad, conductividad térmica, etc.).

Descripción de las actividades prácticas del tema 3: Elaborar un algoritmo general de dinámica molecular. (4 horas). Elaborar de algoritmos de cálculo de coeficientes de transporte. (6 horas). Caracterizar cambios estructurales en sólidos cristalinos. (5 horas)

### Actividades formativas<sup>2</sup>

| Horas de trabajo del alumno por tema |       | Horas teóricas | Actividades prácticas |     |     |     | Actividad de seguimiento | No presencia I |
|--------------------------------------|-------|----------------|-----------------------|-----|-----|-----|--------------------------|----------------|
| Tema                                 | Total | GG             | PCH                   | LAB | ORD | SEM | TP                       | EP             |
| 1                                    | 40    | 10             | 0                     | 0   | 10  | 0   | 0                        | 20             |
| 2                                    | 29    | 4              | 0                     | 0   | 5   | 0   | 0                        | 20             |
| 3                                    | 49    | 14             | 0                     | 0   | 15  | 0   | 0                        | 20             |
| <b>Evaluación<sup>3</sup></b>        | 32    | 2              | 0                     | 0   | 0   | 0   | 0                        | 30             |
| <b>TOTAL</b>                         | 150   | 30             | 0                     | 0   | 30  | 0   | 0                        |                |

GG: Grupo Grande (100 estudiantes).

PCH: prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes)

LAB: prácticas laboratorio o campo (15 estudiantes)

ORD: prácticas sala ordenador o laboratorio de idiomas (30 estudiantes)

SEM: clases problemas o seminarios o casos prácticos (40 estudiantes).

TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).

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

### Metodologías docentes<sup>1</sup>

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 grupo, de trabajos, memorias, ejercicios, problemas, y estudios de caso, sobre contenidos y técnicas, teóricos y prácticos, relacionados con la materia. | X                                     |

<sup>2</sup> Esta tabla debe coincidir exactamente con lo establecido en la ficha 12c de la asignatura.

<sup>3</sup> Indicar el número total de horas de evaluación de esta asignatura.

|   |   |
|---|---|
| 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 tutelados** 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<sup>1</sup>

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<sup>1</sup>

#### 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 %):

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

(\*) 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.

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

<sup>(2)</sup> Resto de asignaturas.

<sup>(3)</sup> Trabajo fin de máster.

### **Descripción de las actividades de evaluación**

Se contemplan dos sistemas alternativos de evaluación:

- Evaluación continua.
- Evaluación con una única prueba final de carácter global.

La elección entre un sistema u otro corresponde al estudiante, quien deberá comunicarlo al profesor de acuerdo con la normativa legalmente vigente y en los pazos que esta determine.

A continuación se describe el sistema de **evaluación continua**.

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 y complementaria)

#### Básica

- D. P. Landau y K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge, New York, 2000).
- D. E. Knuth, *"The Art of Computer Programming"* (Addison-Wesley, New York 1998): Vol. 2 (*Seminumerical Algorithms*) y Vol. 3 (*Sorting and Searching*).
- 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).
- L. M. Barone, E. Marinari y F. Ricci-Tersenghi, *Scientific Programming: C-Language, Algorithms and Models in Science* (World Scientific, Singapur, 2013).
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes Third Edition*, (Cambridge University Press, 2007).
- P. M. Chaikin & T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, (Cambridge University Press, 2006).

#### Complementaria

- D. J. Amit y V. Martín-Mayor, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapur, 2005).
- L. D. Landau y E. M. Lifshitz: "Física Estadística, parte 1". Vol. 5 de 'Curso de Física Teórica'. (Reverté, D.L. 1975);) E. M. Lifshitz y L. P. Pitaevskii: "Física Estadística, parte 2". Vol. 9 de 'Curso de Física Teórica'. (Reverté, D.L. 1986).

### Otros recursos y materiales docentes complementarios

Recursos complementarios irán apareciendo en las web [www.unex.es/eweb/fisteor/juan/](http://www.unex.es/eweb/fisteor/juan/) y en el campus virtual de la asignatura.