



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

Universidad Autónoma del Estado de México

Licenciatura en Física 2003

Programa de Estudios:

Simulación de Sistemas Fuera de Equilibrio



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

I. Datos de identificación

Licenciatura	Física 2003								
Unidad de aprendizaje	Simulación de Sistemas Fuera de Equilibrio		Clave						
Carga académica	4	2	6	10					
	Horas teóricas	Horas prácticas	Total de horas	Créditos					
Período escolar en que se ubica	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Seriación	Simulación de Sistemas de Equilibrio		Ninguna						
	UA Antecedente		UA Consecuente						

Tipo de Unidad de Aprendizaje

Curso	<input type="checkbox"/>	Curso taller	<input checked="" type="checkbox"/>
Seminario	<input type="checkbox"/>	Taller	<input type="checkbox"/>
Laboratorio	<input type="checkbox"/>	Práctica profesional	<input type="checkbox"/>
Otro tipo (especificar)	<input type="text"/>		

Modalidad educativa

Escolarizada. Sistema rígido	<input type="checkbox"/>	No escolarizada. Sistema virtual	<input type="checkbox"/>
Escolarizada. Sistema flexible	<input checked="" type="checkbox"/>	No escolarizada. Sistema a distancia	<input type="checkbox"/>
No escolarizada. Sistema abierto	<input type="checkbox"/>	Mixta (especificar)	<input type="text"/>

Formación común

Biología 2003	<input type="checkbox"/>	Biotecnología 2010	<input type="checkbox"/>
Matemáticas 2003	<input type="checkbox"/>		

Formación equivalente

Unidad de Aprendizaje

Biología 2003	<input type="text"/>
Biotecnología 2010	<input type="text"/>
Matemáticas 2003	<input type="text"/>



II. Presentación

La aparición de equipos de cómputo poderosos ha hecho posible realizar simulaciones numéricas de modelos que no son posibles tratar con las clásicas técnicas teóricas. En muchos casos el equipo de cómputo ha permitido por primera vez a los investigadores no solo tratar e inventar nuevos modelos para diferentes aspectos de la Naturaleza, sino estudiar dichos modelos sin simplificaciones sustanciales. En los últimos años el poder de computación numérica ha crecido considerablemente, el acceso a las computadoras es más fácil y común, y los métodos de simulación numérica son constantemente refinados. Como resultado, las simulaciones numéricas nos proporcionan una base teórica para entender los resultados experimentales, mientras que en otros casos son las mismas simulaciones los "experimentos" con los que la teoría debe ser comparada. Este curso está especialmente orientado para introducir al estudiante de Física, Química o carreras a fines, en los métodos numéricos de simulación en Mecánica Estadística. Se pondrá especial énfasis en el aspecto teórico de los algoritmos y se intentará cubrir un amplio número de problemas. Para seguir el curso, es necesario que el estudiante tenga conocimientos previos de Mecánica Estadística así como de programación. Para aquellos estudiantes que no tengan (o hayan olvidado) conocimientos de programación, se impartirá un módulo de programación en FORTRAN al principio del curso. Al final del curso, los estudiantes deberán realizar un proyecto bajo la supervisión del profesor que será evaluado. Todas estas actividades brindan al discente herramientas valiosas que puede emplear en la industria para su mejor desenvolvimiento.

III. Ubicación de la unidad de aprendizaje en el mapa curricular

Núcleo de formación:

Integral

Área Curricular:

Física Computacional

Carácter de la UA:

Optativa

IV. Objetivos de la formación profesional.

Objetivos del programa educativo:

Formar especialistas con conocimientos de la Física teórica, experimental y computacional que les permitan participar en la generación, aplicación y difusión de los mismos, colaborando en la solución de problemas de índole social y natural que requieran del conocimiento científico.



UAEM

Universidad Autónoma
del Estado de México



Universidad Autónoma del Estado de México • Secretaría de Docencia • Dirección de Estudios Profesionales

Objetivos del núcleo de formación:

Proporcionar una visión integradora de carácter interdisciplinario, multidisciplinario y transdisciplinario para adquirir conocimientos específicos de su interés en los diversos escenarios donde tiene lugar la profesión del Físico.

Objetivos del área curricular o disciplinaria:

Proporcionar las herramientas necesarias para el planteamiento y solución numérica de problemas de la Física auxiliándose de sistemas de cómputo.

V. Objetivos de la unidad de aprendizaje.

Aplicar los métodos de simulación para el estudio de sistemas que no se encuentran en equilibrio. Realizar un proyecto donde se estudie algún sistema físico fuera de equilibrio.

VI. Contenidos de la unidad de aprendizaje y su organización

Unidad 1. Introducción

Objetivo: Se plantea dar una breve descripción del contenido de la unidad de aprendizaje a los discentes, dándoles la información concerniente de los alcances y limitaciones de los métodos de simulación por computadora.

Unidad 2. Métodos de simulación en equilibrio: ensambles y algoritmos

Objetivo: Se revisa el material concerniente a los diferentes métodos para realizar una simulación por computadora. Se incluye un breve repaso del concepto de ensamble y de los diferentes tipos de algoritmos que se pueden usar en una simulación de sistemas en equilibrio.

Unidad 3. Monte Carlo y dinámica molecular fuera de equilibrio.

Objetivo: Se revisa el material concerniente a los diferentes métodos para realizar una simulación por computadora. Se incluye un breve repaso del concepto de ensamble y de los diferentes tipos de algoritmos que se pueden usar en una simulación de sistemas fuera de equilibrio. En particular se analiza el cambio que sufren los algoritmos cuando se introduce un campo de fuerza externo.

**Unidad 4.** Dinámica de Langevin

Objetivo: El material a analizar es el Movimiento Browniano, Ecuaciones del modelo A, modelo B, etc. , Ecuación de Kardar-Parisi-Zhang, simulación numérica de ecuaciones diferenciales estocásticas.

Unidad 5. Ejemplos y ejercicios

Objetivo: Se calculan propiedades termodinámicas y dinámicas en una fase de fluidos simples y moleculares en presencia de una perturbación: gradiente de presión, gradiente de temperatura, etc. Algunos sistemas de interés: Sistemas coloidales fuera de equilibrio, sistemas de reacción-difusión. Fenómenos de crecimiento y Monte Carlo en tiempo continuo.

VII. Sistema de Evaluación

Resolver ejercicios	70%
Tareas	20%
Participación en clase	10%

VIII. Acervo Bibliográfico

A. McQuarrie, Statical mechanics (University Science Books, 2000)

M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer simulation of liquids (Oxford: Clarendon Press., 1987)

D. Frenkel and B. Smit, Understanding molecular simulation (Academic, New York, 1996).

K. Binder and D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An introduction. Springer- Verlag, Berlin (1988).

D. P. Landau and K. Binder, A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press (2000).

M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Clarendon Press, Oxford (1999).

C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods, Springer-Verlag, Berlin, 1997