



Ministerio de Cultura y Educación
 Universidad Nacional de San Luis
 Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
 Departamento: Física
 Area: Area Unica - Física

(Programa del año 2025)
 (Programa en trámite de aprobación)
 (Presentado el 18/12/2025 17:00:42)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
() INTRODUCCIÓN A LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FENÓMENOS COOPERATIVOS.	LIC.EN FISICA	015/0	2025	2° cuatrimestre

6

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
NIETO QUINTAS, FELIX DANIEL	Prof. Responsable	SEC U EX	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	3 Hs	4 Hs	Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
04/08/2025	14/11/2025	15	112

IV - Fundamentación

La Simulación numérica se ha convertido en los últimos años en un rama intermedia entre la física teórica (pues permite validar sus hipótesis) y la física experimental (pues ayuda a la interpretación de los datos). Por este motivo es de importancia para un alumno avanzado de la Lic. Física y carreras afines alcanzar los conocimientos introductorios de un campo de fértil actividad y numerosas aplicaciones de carácter práctico. El curso está dirigido a profundizar en el conocimiento de los aspectos teóricos e instrumentales relacionados con la simulación numérica aplicada a sistemas complejos. Además de un análisis de la teoría que sustenta esta rama del conocimiento, se focalizará en la descripción y estudio de sistemas de gran aplicación actual en el ámbito de la Física de la Materia Condensada.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Se pretende lograr al término del curso que el/la estudiante a) comprenda las razones que llevan a la necesidad de implementar una nueva forma de atacar los problemas de la Mecánica Estadística, en un cuerpo integrado de conocimientos; b) se introduzca en la generación y utilización de algoritmos numéricos alcanzando un dúctil manejo de lenguajes de programación óptimos para atacar este tipo de problemas; c) se familiarice con los conceptos básicos de la simulación numérica, alcanzando un grado de madurez para aplicarlos a problemas concretos y d) desarrolle habilidad para resolver problemas básicos y aplicados, con especial énfasis en aquellos directamente vinculados a la física de los fenómenos superficiales.

VI - Contenidos

Unidad 1: Conceptos básicos de la simulación numérica.

Breve sinopsis histórica acerca de métodos estocásticos. La simulación numérica como una nueva rama de la física. Sistemas complejos de la Mecánica Estadística. Sistemas determinísticos: dinámica molecular. Discusión de errores. Ejemplos de aplicación. Procesos estocásticos: simulación de Monte Carlo. Conceptos básicos de teoría de probabilidad. Cantidades de expectación en el marco de la Mecánica Estadística. Aproximaciones. Ejemplos básicos. Generación de números aleatorios. Ejemplos de algoritmos. Optimización.

Unidad 2: Método de Monte Carlo: muestreo simple.

Determinación de valores de expectación termodinámicos en una asamblea estadística. Promedios estadísticos por el método del muestreo simple. Confiabilidad y determinación de errores. Implementación de un algoritmo tipo. Ventajas y limitaciones del muestreo simple.

Unidad 3: Muestreo simple: ejemplos.

Caminata al azar. Implementación del algoritmo. Obtención de la ley que gobierna el desplazamiento en función del tiempo. Cálculo de la dimensión fractal de un objeto. Dimensión del caminante. Dimensión espectral. Conjetura de Alexander Orbach. Caminata al azar no reversible. Self avoiding random walk. Crecimiento limitado por difusión. Aplicación en diferentes situaciones experimentales. Esquema de la simulación numérica: optimización. Crecimiento de DLA sobre superficies correlacionadas. Problemas de crecimiento. Determinación de la rugosidad superficial. Obtención de exponentes de crecimiento. Algoritmos de crecimiento.

Unidad 4: Muestreo simple: teoría de percolación.

Teoría de percolación. Sistemas percolantes. Concepto de sitio, enlace e islas. Concepto de percolación. Percolación de sitios y de enlaces. Distribución del número de islas de tamaño s . Suposición de escaleo. Perímetro y radio de las islas. Dimensión fractal. Renormalización fenomenológica. Determinación de los exponentes críticos. Algoritmo de Hoshen y Koppelman. Implementación de un algoritmo para determinar umbrales de percolación y exponentes críticos del problema. Análisis de errores.

Unidad 5: Método de Monte Carlo: muestreo pesado.

Necesidad de considerar una distribución de probabilidad para los estados accesibles del sistema estadístico. Cálculo de valores de expectación de cantidades termodinámicas. Distribución de probabilidades. Cadena de Markov. Generación e implementación. Muestreo simple versus muestreo pesado. Interpretación dinámica del Método de Monte Carlo en el marco del muestreo pesado. Errores estadísticos y tiempos de relajación.

Unidad 6: Muestreo pesado: ejemplos.

El modelo de Ising. El problema de la medida finita y el límite termodinámico. Longitud de correlación en sistemas finitos. Efectos de medida finita. La función de escaleo. Determinación de los exponentes críticos ν , β , γ , α , $\beta\gamma$, $\beta\gamma^2$, $\beta\gamma^3$, $\beta\gamma^4$, $\beta\gamma^5$, $\beta\gamma^6$, $\beta\gamma^7$, $\beta\gamma^8$, $\beta\gamma^9$, $\beta\gamma^{10}$, $\beta\gamma^{11}$, $\beta\gamma^{12}$, $\beta\gamma^{13}$, $\beta\gamma^{14}$, $\beta\gamma^{15}$; $\beta\gamma^{16}$; y $\beta\gamma^{17}$; mediante simulación numérica. El cumulante de cuarto orden. Determinación de la temperatura crítica. Análisis de escaleo finito en una transición de fase de primer orden. Simulación de Monte Carlo en la asamblea canónica: dinámica de Kawasaki. Implementación del algoritmo numérico. Simulación de Monte Carlo en la asamblea gran canónica: dinámica de Glauber. Implementación del algoritmo numérico. Medición de razones de crecimiento de islas en la tendencia al equilibrio.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Los/Las estudiantes resolverán en forma individual problemas básicos elementales de simulación numérica bajo la conducción de un docente. Los problemas son de complejidad creciente, cubriendo la mayor parte de los contenidos teóricos dictados. Cada unidad tiene asociada una guía de trabajos prácticos especialmente diseñada al efecto.

VIII - Regimen de Aprobación

RÉGIMEN DE APROBACIÓN

Para aprobar el curso los/las estudiantes:

- Deberán asistir a no menos del 75% de las clases teóricas.
- Realizar y Aprobar todos los Trabajos Prácticos.
- Implementar las simulaciones propuestas
- Exponer artículo científico sobre el tema

IX - Bibliografía Básica

- [1] - "Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics", Ed. K. Binder, Springer, Berlín (1988).
- [2] - "An introduction to Monte Carlo simulation Methods in Physics", D. P. Landau, K. Binder, Springer, Berlin (1989).
- [3] - D. Stauffer, "Introduction to Percolation Theory", Taylor & Francis (1985).

X - Bibliografía Complementaria

- [1] - "Simulation of liquids and solids. Molecular dynamics and Monte Carlo methods in statistical mechanics", Giovanni Cicotti, Daan Frenkel, Ian Mc Donald, North-Holland, Amsterdam (1990).
- [2] - "Introduction to computer simulation methods in theoretical physics", D. W. Hermann, Springer, Berlin, (1989).
- [3] - "Monte Carlo Methods in quantum problems", M. H. Kados Holland, (1985).
- [4] - K. Binder, D.W. Heermann, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics", Springer Verlag, Berlin (1988).
- [5] - D.P. Landau, K.K. Mon, H.-B. Schüttler, "Computer simulation studies in Condensed Matter Physics", Springer Verlag, Berlin (1988).
- [6] - L.D. Landau, E.M. Lifshitz, "Física Estadística", Vol. 5 del Curso de Física Teórica, Editorial Reverte, (1975).
- [7] - H.Eugene Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Claredon Press, Oxford, (1971).
- [8] - J.M. Yeomans, "Statistical Mechanics of Phase Transitions", Oxford Science Publications, Claredon Press, (1992).
- [9] - Nigel Goldenfeld, "Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group", Frontiers in Physics, Addison Wesley Publishing Company (1992).
- [10] - C. Garrod, "Statistical Mechanics and Thermodynamics", Oxford University Press (1995).

XI - Resumen de Objetivos

Introducir a los estudiantes en el estudio de los sistemas mecánicos complejos y cooperativo mediante simulación numérica
Introducir el cuerpo conceptual de la mecánica estadística y la simulación de Monte Carlo.
Introducir los conceptos relacionados con los exponentes críticos

XII - Resumen del Programa

Simulación numérica. Simulación de Monte Carlo. Perspectiva histórica. Método de Monte Carlo: muestreo simple. Casos particulares. teoría de Percolación. cálculo de exponentes críticos, Método de Monte Carlo: muestreo pesado, modelo de Ising. cálculo de exponentes críticos. Relaciones de escalamiento y de hiperescalamiento.

XIII - Imprevistos

Se completará el CH Total con clases de consultas.
Solicito la aprobación del programa por tres años.

XIV - Otros

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA

Profesor Responsable

Firma:

Aclaración:

Fecha: