

MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS

Curso 2012/2013

(Código: 21156134)

1. PRESENTACIÓN

La asignatura Modelización y simulación de sistemas complejos, enmarcada en la materia Métodos Avanzados de Simulación, aborda de manera fundamentalmente práctica el estudio de una serie de técnicas de simulación que resultan ser adecuadas para los problemas teóricos que se abordan en otras asignaturas del módulo Física Estadística de Sistemas Complejos.

Se presentan algunos de los métodos de simulación que se usan para el estudio de sistemas estocásticos clásicos y cuánticos (por ejemplo, métodos de tipo Monte Carlo, dinámica molecular, técnicas de propagación dinámica...).

La asignatura es optativa, se imparte en el segundo cuatrimestre, y consta de 6 ECTS, equivalentes a unas 150 horas de trabajo del estudiante. A título orientativo, las horas de trabajo se distribuyen de la siguiente manera:

Trabajo con contenido teórico (lectura y consulta de los materiales didácticos): 20%

Trabajo autónomo (estudio de los contenidos teóricos): 20%

Realización de las actividades prácticas y elaboración de los informes de resultados: 60%.

2. CONTEXTUALIZACIÓN

Esta asignatura tiene el objetivo de abordar el estudio de algunas de las técnicas de simulación más habituales que puedan ser aplicadas para resolver algunos de los problemas teóricos que se abordan en otras asignaturas del Máster y para la realización del trabajo Fin de Máster, con aplicaciones tanto en los campos de sistemas clásicos como cuánticos.

Por consiguiente, los conocimientos que aportará habrán de ampliar aquellos que el estudiante pueda ya tener de sus estudios de licenciatura o grado, potenciándolos para que pueda aplicarlos en sus estudios de Máster, mejorando la base conceptual y práctica de alguna de las asignaturas.

Por otra parte, y no en menor medida, intenta mostrar al estudiante la relevancia que tienen la modelización computacional y las simulaciones numéricas en la resolución de aquellos problemas físicos cuya complejidad impide su descripción mediante un estudio analítico simple.

3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Para abordar la asignatura con garantías de éxito son precisos algunos conocimientos en Matemáticas y Física adquiridos en asignaturas de grado/licenciatura. En particular:

- 1.- Métodos Numéricos, álgebra lineal y análisis matemático (al nivel de estudios de grado en Ciencias o Ingeniería).
- 2.- Mecánica Cuántica básica (o Química Cuántica en las licenciaturas de Química y en algunas titulaciones de ingeniería), en la que se hayan discutido conceptos como función de onda, ecuación de Schrödinger, interpretación probabilística, etc.
- 3.- Mecánica Estadística (o sus variantes como Termodinámica Estadística o nombre similar),



4.- Es muy conveniente el que el estudiante tenga algún conocimiento previo de algunos de los lenguajes de programación estándar en computación científica (Fortran, C, Basic,...).

En general, los conocimientos adquiridos en grados o licenciaturas en Ciencias Físicas o Químicas deben ser suficientes. Es probable, sin embargo, que algunos contenidos sean dificultosos para los estudiantes que provengan de estudios más técnicos.

Dado que hoy en día una buena parte del material bibliográfico está en inglés, es necesario tener conocimiento de este idioma a nivel científico-técnico.

Finalmente, el estudiante ha de estar familiarizado con el uso de ordenadores, ya que buena parte del trabajo de la asignatura está orientado a la ejecución de programas de cálculo. Por esa razón, es importante que el alumno pueda disponer de un ordenador para desarrollar la parte práctica de la asignatura.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Objetivos generales:

- * Transmitir al alumno la relevancia de la modelización computacional y de las simulaciones en la resolución de problemas físicos cuya complejidad impide su solución mediante expresiones analíticas simples.
- * Interconectar los conceptos y modelos de la física con los métodos de análisis numérico necesarios para su solución.
- * Familiarizar al alumno con el uso científico de los lenguajes de programación y su aplicación a la resolución numérica de sistemas físicos.
- * Establecer la relevancia de los métodos Monte Carlo en Física Estadística Clásica y en Mecánica Cuántica.
- * Conocer diferentes métodos de resolución de problemas de autovalores y su aplicación a problemas cuánticos.

Destrezas:

- * Comprensión de la complejidad intrínseca de los sistemas físicos y desarrollo de la capacidad para plantear modelos computacionales para un problema físico sencillo e implementar el modelo en el ordenador.
- * Habilidad para discriminar las magnitudes relevantes en un cálculo de simulación de propiedades físicas.
- * Analizar críticamente las bondades y las limitaciones de los métodos aproximados de resolución de problemas físicos.
- * Uso de herramientas informáticas (lenguajes de programación, aplicaciones de visualización y tratamiento de datos, aplicaciones de cálculo simbólico) en el contexto de la física y matemática aplicada.
- * Saber cómo recopilar información en la web y cómo realizar búsquedas bibliográficas.

Competencias:

- * Capacidad de elección de las herramientas más adecuadas para abordar un proyecto que exija la realización de algún cálculo numérico. Solvencia en el tratamiento de datos y en su análisis crítico.
- * Experiencia en la consulta de documentación técnica (tanto en español como en inglés) de software especializado y en la búsqueda de fuentes de información y bibliográficas necesarias para la ejecución de un proyecto.
- * Facilidad en la comunicación oral y escrita. Exposición ordenada y estructurada.
- * Desarrollo del aprendizaje autónomo, de manera que el estudiante sea capaz de iniciarse en nuevos campos de manera independiente.



Actitudes:

- * Análisis crítico de resultados.
- * Exposición razonada de los resultados de un proyecto de investigación.
- * Capacidad de elección de las herramientas y de la estrategia adecuadas para abordar un proyecto concreto.

5. CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

Tema I. Introducción general a la Asignatura.

Tema II. Algoritmos Monte-Carlo

Simulaciones estocásticas: generadores de números aleatorios.

Cadenas de Markov

Algoritmo de Metrópolis.

Integración numérica de Monte Carlo.

Minimización paramétrica

Métodos de Monte Carlo en equilibrio. El modelo de Ising.

Métodos de Monte Carlo fuera del equilibrio.

Ecuación de Langevin. Dinámica Browniana.

Tema III: Física Cuántica Computacional

Breve repaso del formalismo cuántico

Física cuántica y Álgebra lineal. Representación de operadores. Técnicas de diagonalización.

Ecuación de Schrödinger para una partícula. Integración de la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo: técnicas de propagación dinámica.

Introducción a los métodos autoconsistentes para sistemas de muchas partículas.

Dinámica molecular: aproximación de Born-Oppenheimer y métodos Car-Parrinello.

6. EQUIPO DOCENTE

- [JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO](#)
- [EVA MARIA FERNANDEZ SANCHEZ](#)
- [HERNAN SANTOS EXPOSITO](#)

7. METODOLOGÍA



La metodología de la asignatura está basada en la enseñanza a distancia, donde tiene gran importancia el aprendizaje autónomo, para lo que recomienda una bibliografía básica que cubre todo el programa.

Asimismo dispondrán, a través de una plataforma educativa virtual de la UNED y en el espacio dedicado al Curso virtual de esta asignatura, de materiales de apoyo (material complementario, material específico para alguno de los temas del programa, ejercicios prácticos, etc.). Además, en el Curso se propondrán las prácticas que los estudiantes deberán realizar a lo largo del curso.

El apoyo docente se hará a través de la comunidad del Curso virtual mediante los foros de los estudiantes y la tutoría telemática proporcionada por los profesores de la asignatura (con sus correspondientes herramientas de comunicación: foros, correo, tutoría telemática), correo electrónico, teléfono y visita personal si se considerase necesaria.

La parte práctica de esta asignatura es esencial, y está centrada en la utilización de códigos de simulación usando las herramientas informáticas adecuadas. En estos trabajos prácticos se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a problemas específicos.

8. BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

El texto básico para preparar la asignatura es

J. M. Thijssen "Computational Physics", Cambridge University Press, 2001.

que cubre prácticamente todo el contenido del curso. En particular, describe en detalle las distintas técnicas de Monte-Carlo así como los métodos autoconsistentes y la dinámica molecular cuántica.

En el curso virtual se dispondrán a disposición de los estudiantes materiales de resumen de los contenidos teóricos de la asignatura.

9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

Para el apartado sobre las técnicas de diagonalización se pueden consultar los dos textos siguientes:

- J. D. Faires y R. Burden: Métodos Numéricos (3ª edición), Thomson Editores, España, 2004. (Alternativamente puede utilizarse el texto Análisis Numérico, de los mismos autores, editado por Thomson Internacional en México. Las diferencias con el anterior son mínimas).

- C. F. Gerald y P. O. Wheatley: Análisis Numérico con Aplicaciones (Sexta edición), Prentice Hall, Pearson Education, México, 2000

Sobre las técnicas Monte Carlo una referencia muy completa es:

- D. P. Landau y K. Binder. A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press (2000, última edición, 2009).

Una revisión general muy citada sobre métodos numéricos es

- Press, Teukolsky, Vetterling, Flannery Numerical Recipes: the art of scientific computing 3rd edition", Cambridge University Press, 2007.

10. RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

Todos los recursos de apoyo al estudio se pondrán a disposición de los estudiantes en el curso virtual de la asignatura materiales para el trabajo de la asignatura.

El estudiante ha de prestar particular atención a:



- Los contenidos teóricos complementarios (distribuidos en ficheros pdf),
- Esquemas para la realización de los trabajos prácticos

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

El medio básico de comunicación entre estudiantes y equipo docente son las herramientas de comunicación del Curso virtual (Correo y Foros de debate). Además, podrán utilizarse el correo electrónico, el teléfono y la entrevista personal.

Profesor: Julio Juan Fernández Sánchez (coordinador)

E-mail: jjfernandez@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7142

Horario: Miércoles, de 16 a 20 h

Despacho: 206 - Facultad de Ciencias

Profesor: J. E. Alvarellos

E-mail: jealvar@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7120

Miércoles, de 16 a 20 h

Despacho: 207 - Facultad de Ciencias

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Se realizará a partir de la realización de varias prácticas en las que el estudiante, de manera individual, utilizará códigos de cálculo a problemas relacionados con los contenidos del curso.

La calificación se determinará a partir de la ejecución de estas prácticas, junto con la presentación de sus correspondientes informes que han de incluir una discusión detallada del trabajo realizado.

Se valorará positivamente a la hora de establecer la calificación final la participación activa del estudiante en los foros de discusión dentro del curso virtual.

Optativamente, y siempre en colaboración con otros estudiantes (grupos de tres personas como máximo) se podrán realizar proyectos más avanzados que sean sugeridos por el equipo docente. Estos trabajos pueden incrementar la calificación final hasta un 20%.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

