ASIGNATURA DE MÁSTER:

MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS

Curso 2013/2014

(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 métodos de simulación que se usan para el estudio de sistemas complejos tanto clásicos como cuánticos.

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 los 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 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. Por ese motivo, es conveniente que el estudiante conozca algún lenguaje de programación científico para aplicar las técnicas que aquí se estudian.

3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Para abordar la asignatura con garantías de éxito son precisos conocimientos suficientes en algunas áreas de Matemáticas y Física que hayan sido 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 (o Química Cuántica en las licenciaturas de Química y en algunas titulaciones de ingeniería), en la que

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
CA7E1D50F12D84BFF682A3E0C1244E9

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:

* Trasmitir 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.

* 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 alguna simulación numérica. 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 proyectos.

* Facilidad en la comunicación escrita. Exposición ordenada y estructurada.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
CA7E1D50F12D84BFF682A3E0C1244E9

* 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 o tarea 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 I

Simulaciones estocásticas: generadores de números aleatorios.

Cadenas de Markov

Algoritmo de Metrópolis.

Integración numérica de Monte Carlo.

Tema III. Algoritmos Monte-Carlo II

Muestreo relevante.

El modelo de Ising.

Conjuntos estadísticos.

Ecuación de Langevin.

Tema IV: Física Cuántica: una partícula

Breve repaso del formalismo cuántico.

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

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula.

Integración de la ecuación de Schrödinger,

Tema V: Física Cuántica: muchas partículas

Introducción a los métodos autoconsistentes para sistemas de muchas partículas.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
CA7E1D50F12D84BFF682A3E0C1244E9

Resolución de la ecuación de Schrödinger para sólidos con estructura cristalina periódica.

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.

En el curso se recomienda una bibliografía básica que cubre todo el programa. Asimismo los estudiantes dispondrán, a través de la plataforma educativa virtual de la UNED (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 actividades prácticas que los estudiantes deberán realizar a lo largo del curso.

El apoyo docente se hará a través de la comunidad del Curso virtual (foros, tutoría telemática, correo electrónico, etc.).

La parte práctica de esta asignatura es esencial, y está centrada en la utilización de códigos de simulación usando las herramientas informáticas adecuadas. En estas tareas se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a problemas específicos planteados por el equipo docente.

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

El texto básico para preparar la asignatura es

J. M. Thijssen “Computational Physics”, second edition, Cambridge University Press, 2007.

que cubre prácticamente todo el contenido del curso.

En el curso virtual se dispondrá diversos material adicional para la asignatura a disposición de los estudiantes.

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

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
CA7E1D50F12D84BFF682A3E0C1244E9

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

Se pondrá a disposición de los estudiantes, en el curso virtual de la asignatura, material de apoyo para el estudio de la asignatura.

Se potenciará el uso de los Foros para las dudas y comentarios sobre los contenidos y las tareas del curso, y se valorará muy positivamente la participación activa de los estudiantes en ellos.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

El medio básico de comunicación y tutorización entre estudiantes y equipo docente son las herramientas de comunicación del Curso virtual, especialmente los 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 tareas en las que el estudiante, de manera individual, desarrollará o utilizará códigos de cálculo para resolver 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.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

Ámbito: GUI - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/
CA7E1D50F12D84BFF682A3E0C1244E9