ASIGNATURA DE MÁSTER:

MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS

Curso 2016/2017

(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 son de interés por sí mismas y que resultan ser adecuadas para problemas que se tratan en otras asignaturas del Máster.

Se presentan algunos de los métodos de simulación que habitualmente se utilizan 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, estudio de los contenidos teóricos): 40%
- 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 técnicas de simulación habituales que se utilizan para resolver algunos de los problemas teóricos que se abordan en este Máster, tanto en sistemas clásicos como cuánticos. También pueden ser aplicables en la realización del trabajo Fin de Máster
Por consiguiente, los conocimientos que aporta ampliarán los que el estudiante pueda ya tener de sus estudios de licenciatura o grado, potenciándolos para que pueda aplicarlos en sus estudios de Máster, y ayudando a mejorar 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.

Por estas razones, es necesario 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) y Estado Sólido, en la que se hayan discutido conceptos como función de onda, ecuación de Schrödinger, interpretación probabilística, periodicidad cristalina, estructura de bandas, etc.

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/
1D81812E7F18152746 1E8B20F78082AB

3.- Mecánica Estadística (o sus variantes como Termodinámica Estadística o nombre similar).

4.- Es necesario que el estudiante tenga conocimiento previo de algunos de los lenguajes de programación estándar en computación científica (entre otros, 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, por lo que es conveniente que los adquieran antes o durante el estudio de la asignatura.

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 de simulación. Por esa razón, es importante que el alumno pueda disponer de un ordenador para desarrollar la parte práctica de la asignatura y que conozca algún lenguaje de programación de cálculo científico.

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.

* Establecer la relevancia de los algoritmos de Monte Carlo para sistemas clásicos.

* Dentro de la Física Cuántica Computacional, conocer diferentes métodos de resolución de los problemas de autovalores y su aplicación a diferentes problemas.

* Familiarizar al alumno con el uso científico de los lenguajes de programación y su aplicación a la resolución numérica de sistemas físicos.

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, estructurada y crítica.

* Desarrollo del aprendizaje autónomo, de manera que el estudiante sea capaz de iniciarse en nuevos campos de manera independiente.

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/
1D81812E7F18152746 1E8B20F78082AB

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

A)

Simulaciones estocásticas: generadores de números aleatorios.

Cadenas de Markov

Algoritmo de Metrópolis.

Integración numérica de Monte Carlo.

B)

Muestreo relevante.

El modelo de Ising.

Conjuntos estadísticos.

Ecuación de Langevin.

Tema III: Física Cuántica Computacional

A) Física Cuántica: una partícula

Breve repaso del formalismo cuántico. Representación de operadores. Técnicas de diagonalización.

Soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula.

Integración numérica de la ecuación de Schrödinger.

B) Física Cuántica: muchas partículas

Introducción a los métodos autoconsistentes para sistemas de muchas partículas. Métodos de Hartee-Fock y del Funcional de la densidad.

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

6.EQUIPO DOCENTE

- JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO

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/
1D81812E7F18152746 1E8B20F78082AB

- 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. La docencia se impartirá a través de un curso virtual dentro de la plataforma aLF de la UNED. Dentro de ese curso virtual los estudiantes dispondrán de:

(a) Información y Materiales:

Comentarios sobre los distintos temas del programa.

Recursos, donde se proporcionan materiales de apoyo (material complementario, material específico para alguno de los temas del programa, ejercicios prácticos, etc.).

(b) Herramientas de comunicación:

Foros de debate, para las preguntas y el intercambio de conocimientos, dudas, etc.

Plataforma de entrega de los trabajos, exámenes, problemas y otras posibles herramientas de calificación.

Además, en el Curso se propondrán las Tareas o actividades prácticas que los estudiantes deberán realizar a lo largo del curso. Esta parte práctica de esta asignatura es esencial, y está centrada en la realización o la utilización de códigos de simulación usando las herramientas informáticas adecuadas. En estas tareas se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a problemas específicos, y en algunas de ellas será necesario la programación del cálculo necesario (véase el apartado sobre la Evaluación).

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9781107677135
Título: "COMPUTATIONAL PHYSICS" (PAPERBACK) (Segunda edición)
Autor/es: J. M. Thijssen ;
Editorial: : CAMBRIDGE UNIVERSITTY PRESS

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

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. Esta segunda edición acaba de ser publicada en rústica (ISBN 978-1107677135).

En el curso virtual se pondrá también a disposición de los estudiantes otro material adicional para el estudio de la asignatura.

9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

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/
1D81812E7F8152746 1E8B20F78082AB

Comentarios y anexos:

Para el apartado sobre las técnicas de diagonalización se pueden consultar textos de Métodos numéricos, entre ellos 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 (no sobre Física computacional en general) 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, así como material que permita entender mejor la aplicación de los conceptos teóricos a las simulaciones que se realizarán en las Tareas del curso.

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 10:00 a 12:00 y de 16:00 a 18:00
Despacho: 206 - Facultad de Ciencias. UNED

Profesor: J. E. Alvarellos
E-mail: jealvar@fisfun.uned.es
Teléfono: 91 398 7120
Horario: Miércoles, de 11:00 a 13:00 y de 16:00 a 18:00
Despacho: 207 - Facultad de Ciencias. UNED.

Profesora: Eva María Fernández Sánchez
E-mail: emfernandez@fisfun.uned.es
Teléfono: 91 398 8863
Horario: Miércoles, de 11:00 a 13:00 y de 15:00 a 17:00
Despacho: 234 - Facultad de Ciencias. UNED

Departamento de Física Fundamental, Facultad de Ciencias.
c/ Paseo Senda del Rey nº 9, Ciudad Universitaria,
28040 Madrid (la Facultad de Ciencias de la UNED está situada junto al río Manzanares, y al Puente de los Franceses).

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/
1D81812E7F81527461E8B20F78082AB

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Se realizará a partir de la realización de un conjunto de cinco Tareas prácticas obligatorias en las que el estudiante, de manera individual, desarrollará por sí mismo (o utilizará) códigos de cálculo para resolver problemas relacionados con los contenidos del curso. Por ese motivo, es necesario que el estudiante sea conocedor de algún lenguaje de programación científico.

Estas Tareas se plantean de manera muy abierta, dado que este es un máster a distancia con un enfoque académico investigador, y se valorarán los aspectos más originales del trabajo realizado (no se van a calificar, pues como si fuesen problemas o exámenes cerrados). Se quiere motivar especialmente a los estudiantes a que lleven a cabo desarrollos propios o análisis de aquellos puntos que les han llamado la atención en cada Tarea y que presenten conclusiones claras de su trabajo.

La calificación se determinará a partir de la ejecución de estas Tareas y la presentación de sus correspondientes informes, que han de incluir una discusión detallada y crítica del trabajo realizado. Como guía general, en esas memorias se debe “explicar el trabajo que han realizado, justificándolo debidamente”, y no solamente limitarse a “describir paso a paso lo que han hecho”.

Finalmente, se valorará muy positivamente a la hora de establecer la calificación final la participación activa del estudiante en los foros de discusión 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/
1D81812E7F18152746 1E8B20F78082AB