

23-24

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE
SISTEMAS COMPLEJOS

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS

CÓDIGO 21156134

UNED

23-24

MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE
SISTEMAS COMPLEJOS

CÓDIGO 21156134

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA
IGUALDAD DE GÉNERO

Nombre de la asignatura	MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS COMPLEJOS
Código	21156134
Curso académico	2023/2024
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 2
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

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 habitualmente se utilizan para el estudio de sistemas complejos, tanto clásicos como cuánticos. Muchas de esas técnicas tienen interés por sí mismas y porque resultan ser adecuadas en problemas tratados en otras asignaturas del Máster.

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

- 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%.

Aunque el objetivo básico es conocer y poner en práctica técnicas de simulación para la resolución numérica de algunos problemas teóricos, no en menor medida intenta dejar claro al estudiante la relevancia que tienen la modelización computacional y las simulaciones numéricas en la resolución de problemas físicos cuya complejidad impide su descripción mediante un estudio analítico.

Los conocimientos que aporta la asignatura ampliarán los que el estudiante pueda ya tener de sus estudios previos, potenciándolos para su aplicación y ayudando a mejorar la base conceptual y práctica. Por ese motivo, puede ser de interés como formación para la realización del trabajo Fin de Máster.

Es necesario que el estudiante **tenga suficiente conocimiento de algún lenguaje de programación científico** para que sea capaz de codificar los algoritmos y aplicar las técnicas que aquí se estudian. Además, es recomendable que dicho lenguaje sea compilable para que resulte más útil al realizar simulaciones largas, que son necesarias en algunas de las Tareas prácticas que debe realizar el estudiante para ser evaluado en la asignatura.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Para seguir el estudio de 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 algunos grados en Ciencias o Ingeniería).
- 2.- **Mecánica Cuántica** (o Química Cuántica en las licenciaturas de Química y en algunas titulaciones de ingeniería) y **Física del Estado Sólido**, en la que se hayan discutido conceptos como función de onda, ecuación de Schrödinger, interpretación probabilística, periodicidad cristalina, estructura de bandas, etc.
- 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,..., preferiblemente compilables) ya que debe escribir códigos y ejecutar programas para realizar las Tareas del curso.

En general, los conocimientos adquiridos en grados o licenciaturas en Ciencias Físicas o Químicas deberían 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 que tengan disponibilidad para hacerlo durante el estudio de la asignatura.

Recalcamos que 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 propios de cálculo de simulación. Por esa razón, es necesario que el alumno disponga de un ordenador para desarrollar la parte práctica de la asignatura y que además tenga buen conocimiento de algún lenguaje de programación para cálculo científico, para que sea capaz de codificar los algoritmos y aplicar las técnicas que aquí se estudian. Es recomendable que dicho lenguaje sea compilable para que resulte más útil al realizar simulaciones largas.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO
jealvar@fisfun.uned.es
91398-7120
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad

EVA MARIA FERNANDEZ SANCHEZ (Coordinador de asignatura)
emfernandez@fisfun.uned.es
91398-8863
FACULTAD DE CIENCIAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

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.

Nota importante: el equipo docente puede cambiar con posterioridad a la redacción de esta información. En todo caso, los profesores que constan en el apartado "Equipo docente" están actualizados.

Profesora: Eva M. Fernández Sánchez (coordinadora)

E-mail: emfernandez@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 8863

Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca).

Paseo Senda del Rey 5. 28040 Madrid, España.

Profesor: José E. Alvarellós

E-mail: jealvar@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7120

Horario: Miércoles, de 12:00 a 14:00 y de 16:00 a 18:00

Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca).

Paseo Senda del Rey 5. 28040 Madrid, España.

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Adquirir capacidad de análisis y síntesis.
- CG02 - Adquirir capacidad de organización y planificación.
- CG03 - Adquirir conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio
- CG06 - Adquirir capacidad de toma de decisiones
- CG05 - Adquirir capacidad para resolución de problemas
- CG07 - Ser capaz de trabajar en equipo
- CG08 - Adquirir razonamiento crítico
- CG10 - Adquirir capacidad de aprendizaje autónomo
- CG11 - Adquirir capacidad de adaptación a nuevas situaciones

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Saber utilizar y relacionar los diferentes tipos de descripción (microscópica, mesoscópica y macroscópica) de los fenómenos físicos
- CE02 - Comprender las propiedades cualitativas de las soluciones a las ecuaciones de la física (sus tipos, estabilidad, singularidades, etc.) y su dependencia de los parámetros que definen un sistema físico
- CE03 - Comprender el papel del ruido y las fluctuaciones en los fenómenos físicos y manejar su modelización matemática
- CE04 - Comprender y saber relacionar matemáticamente las propiedades macroscópicas de un sistema con las interacciones y la geometría de los elementos microscópicos del mismo
- CE05 - Capacidad de análisis de problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia
- CE06 - Capacidad de formular modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales)
- CE07 - Saber construir modelos numéricos para fenómenos descritos por ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales) con diferentes condiciones iniciales o de contorno
- CE08 - Capacidad de realizar análisis críticos de resultados experimentales, analíticos y numéricos
- CE09 - Capacidad de búsqueda de bibliografía y fuentes de información especializadas. Manejo de las principales bases de datos de bibliografía científica y de patentes
- CE10 - Conocimiento avanzado del estado actual y la evolución de un campo de investigación concreto

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.
- * 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 dichos modelos 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.

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.

CONTENIDOS

Tema I. Introducción general a la asignatura

Nota importante: La asignatura *Modelización y simulación de sistemas complejos* aborda de manera fundamentalmente práctica el estudio de una serie de técnicas que son adecuadas para simular problemas físicos.

Para abordar la asignatura con garantías es preciso tener conocimientos previos suficientes en Matemáticas y Física. En general, los conocimientos adquiridos en grados o licenciaturas en Ciencias Físicas o Químicas deberían ser suficientes; sin embargo, es posible que algunos contenidos sean dificultosos para los estudiantes que provengan de estudios más

técnicos.

En particular, deben tenerse conocimientos de Métodos Numéricos, álgebra lineal y análisis matemático, **Mecánica Cuántica** básica (o Química Cuántica en las licenciaturas de Química y en algunas titulaciones de ingeniería), **Mecánica Estadística** (o sus variantes como Termodinámica Estadística o nombre similar) y **Física del Estado Sólido**.

Los estudiantes deben saber que hay contenidos importantes del tema 3 (en particular, Física Cuántica y Física del Estado Sólido) sobre los que deben ponerse al día cuanto antes si les fuese necesario.

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 también importante que el alumno disponga de un ordenador para el desarrollo de la parte práctica de la asignatura. Además, **es necesario que el estudiante tenga suficiente conocimiento previo de algunos de los lenguajes de programación estándar en computación científica** (Fortran, C,...; siendo deseable que el lenguaje se pueda compilar) ya que debe desarrollar por sí mismo (y utilizará) códigos de cálculo para resolver problemas relacionados con los contenidos del curso.

Dado que en la Física solo es posible encontrar soluciones analíticas a los problemas en unas muy pocas ocasiones, es necesario utilizar una aproximación numérica para ser capaces de obtener resultados de interés. En este tema se presenta un breve esquema de las principales ideas que subyacen a un curso de Física Computacional, de la que esta asignatura es una introducción.

Tema II. Algoritmos Monte-Carlo

Dentro del campo de los sistemas estocásticos clásicos, en este tema se aborda el estudio de los métodos de tipo Monte Carlo, basados en el uso de los números aleatorios, que permiten el cálculo de promedios de magnitudes físicas en sistemas de muchas partículas. Por otra parte, se propone también el uso de estos métodos para la evaluación de integrales numéricas.

Tema III: Física Cuántica Computacional

En esta parte del curso abordamos el problema de la resolución de la ecuación de Schrödinger para sistemas electrónicos. Se comienza con un repaso de aquellos conceptos de Mecánica Cuántica que el estudiante debe conocer. En el capítulo se repasan los conceptos de base de representación, matrices asociadas a operadores y se introducen algunas técnicas de diagonalización que permiten obtener la solución de la ecuación de Schrödinger para diferentes problemas. Seguidamente, se introduce a los alumnos en los denominados métodos autoconsistentes (o métodos SCF) de resolución de la ecuación de

Schrödinger. Se presentan los métodos fundamentales: la aproximación de Hartree-Fock y los métodos basados en el uso del funcional de la densidad (métodos DFT). Para la simulación de la dinámica de grupos de átomos (o moléculas) que interactúan entre sí se introducen los métodos de dinámica cuántica molecular, en los que se hace uso del formalismo cuántico. Se introducirán los conceptos y teoremas que permiten abordar este problema usando la aproximación de Born-Oppenheimer y la dependencia temporal en la ecuación de Schrödinger. Finalmente se aborda la solución de la ecuación de Schrödinger en sólidos periódicos. En esta parte se verá cómo el problema de, en un principio, un número infinito de electrones puede reformularse en términos de un número mucho menor de electrones: los electrones de la celda unidad.

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 virtual de la UNED, en el que los estudiantes dispondrán de:

(a) Información y Materiales:

Comentarios sobre los distintos temas del programa, así como materiales de apoyo (material complementario, material específico para alguno de los temas del programa, ejemplos prácticos, etc.).

(b) Herramientas de comunicación:

Foros de consulta y debate, para preguntas e intercambio de conocimientos, dudas, etc., y plataforma de entrega de informes de las Tareas prácticas.

(c) En el curso se propondrán las **Tareas** o actividades prácticas que los estudiantes deberán realizar a lo largo del curso. Esta parte práctica de la asignatura es esencial, y está centrada en la programación (o la utilización) de códigos de simulación usando un lenguaje de programación científico. En estas tareas se aplicarán los conocimientos teóricos que se han adquirido a problemas específicos. **En algunas Tareas tendrá un peso importante la programación por parte del estudiante del código de cálculo que debe computar el ordenador** (véase el apartado sobre la Evaluación).

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen

No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad

No

Descripción

La evaluación de la asignatura se realizará a partir de la realización individual de cinco Tareas prácticas obligatorias y de las memorias presentada sobre ellas. En las tareas el estudiante, entre otras cosas, 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 conozca bien algún lenguaje de programación científico. Las Tareas y los plazos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

El estudiante, por tanto, ha de estar suficientemente familiarizado con el uso de ordenadores y la programación en un lenguaje científico de cálculo, ya que buena parte de las Tareas mencionadas se basan en el diseño, programación y ejecución de programas de cálculo (en algunos casos, alguno de ellos se aporta por el equipo docente).

Uno de los objetivos principales de las Tareas es que el estudiante muestre cierta independencia, dado el enfoque académico investigador del máster. Por ese motivo, deben los estudiantes prestar atención a los aspectos más originales, y analizar aquellos puntos que más les sorprenda en cada Tarea.

Finalmente, se valorará muy positivamente la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

Criterios de evaluación

Las Tareas se plantean de manera muy abierta, por lo que el estudiante debe mostrar independencia, dado que está cursando un máster a distancia con un enfoque académico investigador. Por ese motivo, se valorarán los aspectos más originales del trabajo realizado (no se van a calificar las tareas como si fuesen problemas o exámenes cerrados). Especialmente, se quiere motivar 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 se ha realizado, justificándolo debidamente, y no limitarse a describir meramente los pasos que se han ido haciendo.

Se requerirá una calificación mínima en cada trabajo. Si todos los trabajos superan esta calificación mínima, la calificación final será la media ponderada de las calificaciones individuales (véase la ponderación en el apartado *¿cómo se obtiene la calificación final?*).

Se valorará también muy positivamente la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

Las Tareas tendrán las siguientes fechas aproximadas de entrega:

Tarea 1: 15 de marzo

Tarea 2: 30 de abril

Tarea 3: 20 de mayo

Tarea 4: 10 de junio

Tarea 5: 25 de junio

Los estudiantes que por alguna circunstancia no puedan seguir el calendario ordinario podrán entrar en la convocatoria de septiembre. Las fechas aproximadas de entrega serán: una parte de los trabajos, antes del 25 de julio; y el resto, antes del 20 de septiembre. El número concreto de trabajos a entregar en cada fecha y los plazos exactos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

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 se ha realizado, justificándolo debidamente, y no limitarse a describir paso a paso lo que se ido haciendo.

Se requerirá una calificación mínima en cada trabajo. Si todos los trabajos superan esta calificación mínima, la calificación final será la media ponderada de las calificaciones individuales (véase la ponderación más abajo).

Se valorará también muy positivamente la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

Tarea 1: 15%

Tarea 2: 40%

Tarea 3: 20%

Tarea 4: 10%

Tarea 5: 15%

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9781107677135

Título:"COMPUTATIONAL PHYSICS" (PAPERBACK)Segunda edición

Autor/es:

Editorial:: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS

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 está 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.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

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 (y a veces, criticada) sobre **métodos numéricos** (aunque debe hacerse notar que no es un texto de Física computacional o simulación en general) es

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

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

En el curso virtual de la asignatura está a disposición de los estudiantes material de apoyo para el desarrollo de la asignatura, así como material que permita entender mejor la aplicación de los conceptos teóricos a las simulaciones que se realizarán en las Tareas del curso.

Los estudiantes deben usar los Foros para las dudas y comentarios sobre los contenidos y las Tareas del curso, y se valorará muy positivamente la participación activa en ellos.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.