



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



ICB
INSTITUTO DE CIENCIAS BÁSICAS
Naturaleza - Ciencia - Humanismo

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CUYO

Instituto de Ciencias Básicas

Licenciatura en Ciencias Básicas

Orientaciones: Biología, Física, Matemática y Química

INTRODUCCION A LAS SIMULACIONES NUMERICAS EN CIENCIAS BASICAS 2013

Profesor responsable: Eduardo M. Bringa

Profesor colaborador: Mario G. Del Pópolo

Auxiliar: Emmanuel Millán (adscripto)

Carga Horaria: 80 horas (32 horas teóricas y 48 prácticas)

1- REQUISITOS DE CURSADO

Correlativas aprobadas: Física General II A y II B (F102 A y F102B) o Elementos de Física General II A y B (FE102A y FE102B), Introducción al Álgebra Lineal (M104), Acreditaciones de competencias de Inglés (I 101 e I 102).

2- OBJETIVOS

- Presentar un conocimiento básico sobre el campo de las simulaciones utilizadas en ciencias básicas y aplicadas, tales como química, biología, física, matemática, ecología, ciencias de los materiales, y ciencias del medio ambiente, etcétera.
- Analizar/ estudiar/ proveer ejemplos de cada disciplina donde las simulaciones fueron exitosas en anticipar, reproducir y/o explicar resultados experimentales.
- Integrar los conocimientos adquiridos en el ciclo básico en la resolución de problemas interdisciplinarios utilizando simulaciones numéricas.
- Obtener experiencia práctica en diseñar y llevar a cabo simulaciones computacionales.

3- CONTENIDOS ANALÍTICOS

1. **Introducción:** Qué son las simulaciones. Relevancia de las simulaciones numéricas y relación con experimentos. Etapas de una simulación: diseño, construcción y validación de modelos. Software disponible. Introducción a LINUX. Introducción a computación científica en GPUs (tarjetas gráficas).
2. **Sistemas dinámicos:** Aplicaciones en física (péndulo caótico), química (reacciones oscilantes) y biología (sistemas predador-presa). Problemas con valores de contorno: “shooting method”. Aplicaciones en física (resolviendo la ecuación de Schrodinger en 1D), química/biología (distribución de iones en la proximidad de una bio-membrana).
3. **Dinámica Molecular:** fundamentos; condiciones iniciales: estructuras atómicas, condiciones de contorno, temperatura, presión, etcétera; trucos necesarios para simulaciones eficientes; potenciales de interacción entre átomos, moléculas y partículas

granulares/coloidales. Análisis de los resultados de simulación: propiedades estáticas, dinámicas y estructurales. Aplicaciones en física (nanotubos, grafeno, colisiones entre nanopartículas), química (dinámica de reacciones en solución, soluciones coloidales), biología (plegamiento de una macromolécula ideal), y materiales (fractura y plasticidad, medios porosos).

4. **Método de Monte Carlo (MC):** Integración por MC. Procesos de Markov y de Poisson. “Importance Sampling”, Metrópolis MC. MC en distintos ensambles. MC en red y de continuo. Kinetic MC (KMC - MC cinético). Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) (MC por simulación directa). Integración termodinámica y cálculo de energías libres. Aplicaciones en física (modelo de Ising y transiciones de fase), química (cálculo de un perfil de energía libre de reacción), biología (dinámica espacio-temporal de poblaciones por KMC).
5. **Simulación de sistemas continuos:** ecuaciones hidrodinámicas y métodos básicos de elementos finitos (FEM) y dinámica de fluidos (CFD). Método de Ritz. Método de la “partícula en celda” (PIC). Redes de Boltzmann. Aplicaciones en física (interacción con un láser), y ciencia de los materiales (fractura).
6. **Simulaciones multiescala:** Métodos de integración simultánea y de integración secuencial, métodos combinados, incluyendo métodos adaptativos. “Coarse-graining”. Aplicaciones en física (daño por radiación), química (estructuras moleculares), y ciencia de los materiales (fractura, evolución de defectos).
7. **Autómatas celulares y agentes:** Introducción para sistemas en una red, con interacciones a vecinos cercanos. Aplicaciones en biología (evolución de ecosistemas, epidemias), física de sistemas complejos.

4- EXPERIENCIAS A DESARROLLAR

- Clases teóricas con demostraciones in-situ de simulaciones.
- “Laboratorios computacionales”, con software provisto por la cátedra para resolver ejemplos de las distintas unidades del programa.
- Elaboración de propuestas de proyectos de investigación
- Búsqueda bibliográfica. Planteo de preguntas, hipótesis, y metodología.
- Posible diseño de material educativo para la enseñanza de la ciencia utilizando los contenidos de la materia.
- Cada estudiante deberá investigar y presentar una conferencia sobre uno o dos artículos actuales sobre simulaciones, colaborando en el aprendizaje de la evaluación de la calidad y validez de resultados computacionales publicados en revistas indexadas.
- Cada estudiante debe realizar y presentar un proyecto de fin de curso, en base a un tema de su interés, relevante a su tesis o elegido entre un conjunto de temas provisto por el profesor. Los alumnos de posgrado deberán presentar su propio proyecto de investigación o docencia enmarcando sus simulaciones, que deben incluir mayor profundidad que las simulaciones de los alumnos de grado.

5- BIBLIOGRAFÍA

- [1] *An introduction to computational physics*, second edition, Tao Pang, Cambridge University Press; 2006, ISBN-13: 978-0-521-53276-1.
- [2] *Introductory Computational Physics*, by A. Klein and A. Godunov, Cambridge University Press; 2006, ISBN-13: 978-0-521-53562-5.
- [3] *Understanding Molecular Simulation*, by Daan Frenkel and B. Smit, Academic Press;

2001, ISBN-13: 978-0122673511.

[4] *Computer simulation of liquids*, M. P. Allen y D.J. Tildesley, Clarendon Press, 1990, ISBN-13: 978-0198556459.

[5] *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, D.C. Rapaport, Cambridge University Press; 2004, ISBN-13: 978-0521825689.

[6] *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction* K. Binder y D.W. Heermann, Springer, 1992, ISBN-13: 978-3540557296.

[7] *Crystals, Defects and Microstructures: Modeling Across Scales*, R. Phillips, Cambridge University Press; 2001, ISBN-13: 978-0521793575

[8] *Computer Simulations of Dislocations*, V. Bulatov y W. Cai, Oxford University Press, 2006, ISBN-13: 978-0198526148.

[9] *Mechanical Behavior of Materials*, Marc André Meyers y Krishan Kumar Chawla, Cambridge University Press; 2008, ISBN-13: 978-0521866750.

6- METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y DE EVALUACIÓN DURANTE EL CURSADO

Se estudiará tanto la teoría como las metodologías de simulación, mediante presentaciones orales a cargo del docente, lecturas y discusión de literatura actualizada. Además se realizarán trabajos de laboratorio “computacional” utilizando códigos de acceso libre.

Los alumnos deberán realizar un proyecto final, en el que integrarán los contenidos de la materia para diseñar un proyecto de investigación o docencia, según sus objetivos académicos.

Evaluación: El alumno será evaluado de la siguiente manera:

- Mediante 2 exámenes escritos sobre el contenido teórico de la materia (30 % de la nota final).
- Presentación de informes sobre los trabajos de laboratorio computacional (20 % de la nota final).
- Elaboración, desarrollo y presentación de proyectos de investigación o docencia (50 % de la nota final).

7- CONDICIONES DE REGULARIDAD TRAS EL CURSADO

Son requisitos para que un alumno sea considerado **regular**: Aprobar las dos evaluaciones escritas, los informes de laboratorio computacional, y el proyecto final.

8- SISTEMA DE APROBACIÓN Y PROMOCIÓN DE LA ASIGNATURA

La asignatura se considerará promocionada cuando se aprueben con una nota igual o superior a 7 (siete) las evaluaciones escritas, informes de laboratorio y presentación del proyecto.

Los alumnos regulares que no hayan cumplido con todos los requisitos de promoción podrán rendir un examen final escrito para aprobar la materia.

Los alumnos que no cumplan con las condiciones de regularidad deberán rendir el examen final

escrito sobre los contenidos teóricos de la materia y los laboratorios computacionales, y además presentar un proyecto equivalente al proyecto final de la materia.