

PROGRAMA - AÑO 2021			
Espacio Curricular:	INTRODUCCION A LAS SIMULACIONES NUMERICAS EN CIENCIAS BASICAS		
Carácter:	ELECTIVA	Período	1º Semestre
Carrera/s:	TODAS		
Profesor Responsable:	Eduardo Bringa		
Equipo Docente:	--		
Carga Horaria:	Alumnos de grado: 80 horas distribuidas en clases teóricas (32 hs) y prácticas (48 hs). Alumnos de posgrado: 128 horas distribuidas en clases teóricas (32 hs), y prácticas (96 hs).		
Requisitos de Cursado:	Correlativas aprobadas: Física General I, Cálculo I, Introducción al Algebra, Inglés I y II		

1-EXPECTATIVAS DE LOGRO

Adquirir conocimiento y formación detallados sobre la Simulaciones Numéricas en Ciencias Básicas.

2-DESCRIPTORES

Simulaciones Numéricas. Computación de alto desempeño. Dinámica Molecular. Monte Carlo. Autómatas Celulares. Modelado Basado en Agentes.

3-CONTENIDOS ANALITICOS

1. Introducción: relevancia de las simulaciones numéricas y relación con experimentos, introducción a LINUX y computación de alto desempeño.
2. Dinámica Molecular: fundamentos; condiciones iniciales: estructuras atómicas, condiciones de contorno, temperatura, presión, etcétera; trucos necesarios para simulaciones eficientes; potenciales de interacción entra átomos. Análisis de los resultados de simulación: propiedades estáticas, dinámicas, estructurales, etc.
3. Método de Monte Carlo (MC): fundamentos, integración de MC, "Importance Sampling", Metrópolis MC, "Lattice" MC (MC en red), Kinetic MC (KMC -MC cinético), Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) (MC por simulación directa).
4. Simulaciones de autómatas celulares y con modelos basados en agentes: definiciones y clasificación, aplicaciones.
5. Aplicaciones en diferentes áreas incluyendo posiblemente otros métodos y temas avanzados

4-BIBLIOGRAFÍA

-Artículos científicos relacionados al tema, los que se pondrán a disposición de los alumnos con anticipación.

LIBROS:

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

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

5-METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA Y 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 evaluaciones escritas sobre el contenido teórico dado en la materia (20 % 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).
- Evaluación conceptual basada en la participación de los alumnos en clase (10 % de la nota final).

6- 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.

7- SISTEMA DE APROBACIÓN Y/O PROMOCIÓN DEL ESPACIO CURRICULAR

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.

PROMOCIONABLE	SI	X	NO	
----------------------	----	---	----	--



Eduardo M. Bringa (ebringa@yahoo.com)

**FIRMA Y ACLARACIÓN
DEL RESPONSABLE DEL ESPACIO CURRICULAR**