

FICHA DE ACTIVIDADES CURRICULARES

1.1. Indique la denominación de la actividad curricular: **SIMULACIONES NUMÉRICAS EN CIENCIAS BÁSICAS**

1.2. Indique las carreras en las que se dicta la actividad curricular:

Doctorado en Ciencia y Tecnología, Licenciatura en Ciencias Básicas con orientaciones de Biología, Química, Física, y Matemática.

1.2. a. En caso de que la actividad ya sea dictada indique la siguiente información:

Carrera	Orientación	Tipo de dictado	Modalidad	Carácter
Licenciatura en Ciencias Básicas	Biología Química Física Matemática	Clases teóricas, prácticas de laboratorio, y trabajo final integrador.	Presencial	Electiva para posgrado

2. Equipo docente.

2.1. Responsable a cargo de la actividad curricular.

Apellido: Bringa

Nombre: Eduardo

2.2. Profesores:

Apellido: Del Pópolo

Nombre: Mario

3. Carga horaria.

120 horas

3.1. Exprese las cargas horarias relacionadas al dictado de la actividad en horas reloj.

Modalidad	Carga teórica	Carga práctica	Total	Porcentaje
Presencial	60	60	120	<input type="text"/>
No presencial	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Total	60	60	120	

4. Describa los objetivos de la actividad curricular.

- 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.

5. Describa los contenidos de la actividad curricular.

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 2 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

6. Describa las actividades prácticas desarrolladas en la actividad curricular, indicando lugar donde se desarrollan, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación.

-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.

7. Describa la bibliografía de la actividad curricular.

[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; 3 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.

8. Describa la modalidad de evaluación y requisitos de aprobación y promoción.

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).