

Guia docent

230861 - SM - Mètodes Estocàstics per a Optimització i Simulació

Última modificació: 24/05/2024

Unitat responsable: Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Telecomunicació de Barcelona
Unitat que imparteix: 748 - FIS - Departament de Física.

Titulació: MÀSTER UNIVERSITARI EN FÍSICA PER A L'ENGINYERIA (Pla 2018). (Assignatura optativa).
MÀSTER UNIVERSITARI ERASMUS MUNDUS EN BIO & PHARMACEUTICAL MATERIALS SCIENCE (Pla 2021). (Assignatura optativa).

Curs: 2024 **Crèdits ECTS:** 4.0 **Idiomes:** Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: GRIGORI ASTRAKHARCHIK

Altres: Segon quadrimestre:
GRIGORI ASTRAKHARCHIK - 10
JOAQUIN CASULLERAS AMBROS - 10

CAPACITATS PRÈVIES

Càlcul (diferencial i integral). Experiència bàsica en programació numèrica computacional.

REQUISITS

Sense requisits

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Bàsiques:

CB7. Que els estudiants sàpiguin aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi.

CB8. Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judici.

METODOLOGIES DOCENTS

- Classes magistrals
- Classes expositives
- Treball en grup
- Treball escrit
- Resolució de problemes
- Exercicis pràctics

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

- Capacitat per a generació de nombres aleatoris d'acord a lleis simples de distribució de probabilitat
- Capacitat de realitzar una integral multidimensional mitjançant el mètode de Monte Carlo i estimar correctament la seva variància estadística
- Conèixer els mètodes de reducció de variància i la seva elecció òptima segons el tipus de problema a resoldre
- Saber realitzar un programa de càlcul per a la simulació clàssica d'un sistema multiparticular utilitzant el mètode de Metropolis
- Capacitat per a realitzar una optimització multidimensional mitjançant tècniques estocàstiques
- Conèixer els mètodes estocàstics principals que s'utilitzen en l'estudi de sistemes quàntics

HORES TOTALS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores aprenentatge autònom	64,0	64.00
Hores grup gran	36,0	36.00

Dedicació total: 100 h

CONTINGUTS

Mètodes estocàstics per a optimització i simulació

Descripció:

1. Integració Montecarlo: funcions de distribució, tècniques de mostreig, Montecarlo directe, tècniques de reducció de variància, integració multidimensional, mètode de Metropolis.
2. Optimització Montecarlo: simulated annealing, algorismes genètics. Teoria de control òptim.
3. Aplicació del mètode de Montecarlo a sistemes de moltes partícules: sistemes discrets i continus. Simulació clàssica de sistemes en fase condensada: sistemes monoatòmics simples, materials moleculars, bio-molecules.
4. Montecarlo dinàmic: camins aleatoris i equació de difusió, mètodes de Fokker-Planck i de Langevin, dinàmica browniana.
5. Aplicacions del mètode de Montecarlo a sistemes quàntics: funcions d'ona per bosons i fermions, Montecarlo variacional, Montecarlo difusiu, Montecarlo d'integrals de camí.

Objectius específics:

Conèixer les tècniques de la teoria del control òptim i l'aplicació dels mètodes de Montecarlo per trobar la solució òptima.

Saber fer un programa de càlcul per a la simulació clàssica d'un sistema multipartícula mitjançant el mètode Metropolis.

Conèixer la teoria bàsica del mètode Monte Carlo per a sistemes quàntics i saber desenvolupar un codi de càlcul Monte Carlo per al càlcul de les seves propietats.

Activitats vinculades:

Classes de teoria

Pràctiques dirigides

Desenvolupament de codis Monte Carlo

Aprenentatge autònom

Competències relacionades:

CB7. Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi.

CB8. Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, inclogui reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judici.

Dedicació: 100h

Grup gran/Teoria: 36h

Aprenentatge autònom: 64h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

Proves orals 25%

Treballs realitzats per l'estudiant 75%

No es faran reavaluacions.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Presentació de treballs pràctics a l'aula amb equips informàtics.

Informe escrit avaluable.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Kalos, Malvin H. Monte Carlo methods [en línia]. Weinheim: Wiley-Blackwell, 2008 [Consulta: 18/06/2021]. Disponible a: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527626212>. ISBN 9783527407606.
- Frenkel, D.; Smit, B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications [en línia]. London: Academic Press is an imprint of Elsevier, 2023 [Consulta: 28/09/2023]. Disponible a: <https://sciencedirect.com/book/9780323902922>. ISBN 9780323913188.
- Duchi, John C. Introductory lectures on stochastic optimization [en línia]. [Stanford]: Park City Mathematics Institute, Graduate Summer School Lectures [, 2016] Disponible a: <https://stanford.edu/~jduchi/PCMIConvex/>.

RECURSOS

Material informàtic:

- Programació científica. Llenguatges de programació científica i eines de visualització