



Guía docente

230861 - SM - Métodos Estocásticos para Optimización y Simulación

Última modificación: 24/05/2024

Unidad responsable: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de Barcelona

Unidad que imparte: 748 - FIS - Departamento de Física.

Titulación: MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA PARA LA INGENIERÍA (Plan 2018). (Asignatura optativa).
MÁSTER UNIVERSITARIO ERASMUS MUNDUS EN BIO & PHARMACEUTICAL MATERIALS SCIENCE (Plan 2021). (Asignatura optativa).

Curso: 2024

Créditos ECTS: 4.0

Idiomas: Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: GRIGORI ASTRAKHARCHIK

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

CAPACIDADES PREVIAS

Cálculo (diferencial e integral). Experiencia básica en programación numérica computacional.

REQUISITOS

Sin requisitos

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Básicas:

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 juicio.

METODOLOGÍAS DOCENTES

- Clases magistrales
- Clases expositivas
- Trabajo en grupo
- Trabajo escrito
- Resolución de problemas
- Ejercicios prácticos

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

- Capacidad para generación de números aleatorios de acuerdo a leyes simples de distribución de probabilidad
- Capacidad de realizar una integral multidimensional mediante el método de Monte Carlo y estimar correctamente su varianza estadística
- Conocer los métodos de reducción de varianza y su elección óptima según el tipo de problema a resolver
- Saber realizar un programa de cálculo para la simulación clásica de un sistema multiparticular utilizando el método de Metropolis
- Capacidad para realizar una optimización multidimensional mediante técnicas estocásticas
- Conocer los principales métodos estocásticos que se utilizan en el estudio de sistemas cuánticos

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTE

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas aprendizaje autónomo	64,0	64.00
Horas grupo grande	36,0	36.00

Dedicación total: 100 h

CONTENIDOS

Métodos estocásticos para optimización y simulación

Descripción:

1. Integración Montecarlo: funciones de distribución, muestreo, Montecarlo directo, técnicas de reducción de varianza, integración multidimensional, método de Metropolis.
2. Optimización Montecarlo: simulated annealing, algoritmos genéticos. Teoría de control óptimo.
3. Aplicación del método de Montecarlo a sistemas de muchas partículas. Sistemas discretos y continuos. Simulación clásica de sistemas en fase condensada: sistemas monoatómicos simples, materiales moleculares, bio-moléculas.
4. Montecarlo dinámico: caminos aleatorios, ecuación de difusión, métodos de Fokker-Planck y de Langevin, dinámica browniana.
5. Aplicaciones del método de Montecarlo a sistemas cuánticos: funciones de onda para bosones y fermiones, Montecarlo variacional, Montecarlo difusivo, Montecarlo de integrales de camino.

Objetivos específicos:

Conocer las técnicas de la teoría del control óptimo y la aplicación de métodos de Montecarlo para determinar la solución óptima.

Saber realizar un programa de cálculo para la simulación clásica de un sistema multipartícula mediante el método Metropolis.

Conocer la teoría básica del método Monte Carlo para sistemas cuánticos y saber desarrollar un código de cálculo Monte Carlo para el cálculo de sus propiedades.

Actividades vinculadas:

Clases de teoría

Pràcticas dirigidas

Desarrollo de códigos de Monte Carlo

Aprendizaje autónomo

Competencias relacionadas:

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 juicio.

Dedicación: 100h

Grupo grande/Teoría: 36h

Aprendizaje autónomo: 64h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

Pruebas orales 25%

Trabajos realizados por el estudiante 75%

No se harán reevaluaciones.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Presentación de trabajos prácticos en el aula con equipo informático.

Informe escrito evaluable.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- Kalos, Malvin H. Monte Carlo methods [en línea]. 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 línea]. 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 línea]. [Stanford]: Park City Mathematics Institute, Graduate Summer School Lectures [, 2016] Disponible a: <https://stanford.edu/~jduchi/PCMIConvex/>.

RECURSOS

Material informático:

- Programació científica. Recurso Lenguajes de programación científica y herramientas de visualización.