


| | | |
|---|---|------------------------------|
|  | UNIVERSIDAD DISTRITAL FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS | |
| | FACULTAD DE CIENCIAS Y EDUCACIÓN | |
| | PROYECTO CURRICULAR DE LICENCIATURA EN FÍSICA | |
| | SYLLABUS | |
| | NOMBRE DEL ESPACIO ACADEMICO: MECÁNICA ESTADÍSTICA COMPUTACIONAL | |
| CÓDIGO: XX | PERIODO ACADEMICO: 2011-1 | NUMERO DE CREDITOS: 3 |
| TIPO DE ESPACIO ACADEMICO: | NUMERO DE HORAS: | |
| OBLIGATORIO BASICO (NO) | TRABAJO DIRECTO <u> 3 </u> | |
| OBLIGATORIO COMPLEMENTARIO (NO) | TRABAJO MEDIADO <u> 1 </u> | |
| ELECTIVO INTRINSECO (SI) | TRABAJO AUTONOMO <u> 5 </u> | |
| ELECTIVO EXTRINSECO (NO) | | |
| JUSTIFICACIÓN: | | |
| <p>El desarrollo de métodos de cálculo usados en Simulaciones Computacionales (S.M) normalmente incluyen conceptos que van más allá de los contenidos de los cursos estándar de termodinámica y mecánica estadística, lo que implica el desarrollo de espacios académicos electivos que permitan el desarrollo de estos tópicos en profundidad.</p> <p>Adquirir habilidades en la realización de cálculos específicos de propiedades termodinámicas para sistemas complejos, permitirá al estudiante que desee incursionar en el área de la biofísica, adquirir herramientas fundamentales para abordar problemas relacionados con este tópico.</p> | | |
| OBJETIVOS: | | |
| <ul style="list-style-type: none"> ✓ Propiciar elementos para que los estudiantes se familiaricen con los métodos de la mecánica estadística computacional usada en simulaciones computacionales. ✓ Familiarizar a los estudiantes con conceptos fundamentales de la mecánica estadística del siglo XXI. ✓ Fortalecer su formación académica en el campo de la simulación computacional, con el fin de que el futuro licenciado en física esté en capacidad de realizar cálculos termodinámicos o mecánicos estadísticos con el fin de caracterizar el estado termodinámico de un sistema. | | |
| CONTENIDOS: | | |
| <ol style="list-style-type: none"> 1. Fundamentos de física clásica <ol style="list-style-type: none"> 1.1 Elementos de mecánica Hamiltoniana. 1.2 Teorema de Liouville 1.3 Elementos de mecánica estadística 1.4 Funciones de partición 1.5 Potenciales termodinámicos 1.6 Teoría de distribución 1.7 Ensamblajes estadísticos | | |

2. Métodos computacionales
 - 2.1 Introducción a la plataforma Linux y fundamentos de Shell Scripting
 - 2.2 Ensamblajes alternativos para simulaciones computacionales
 - 2.3. Técnicas de cálculo para energías libres computacionales
3. Métodos avanzados
 - 3.1. Funciones de correlación espaciales y temporales
 - 3.2. Teoría de respuesta lineal
4. Tratamiento de datos
 - 4.1. Análisis de datos
 - 4.2. Análisis de errores
 - 4.3. Métodos Montecarlo

METODOLOGIA:

Clases magistrales y Hands On con el computador.

Tutorías de los proyectos a realizar.

| COMPETENCIAS | | |
|-------------------|-------------------------------------|---|
| BASICAS | Procesos de Aprendizaje | Habilidad para: a. Elaborar e interpretar artículos científicos relacionados con el tema. b. Presentar y sustentar oralmente los ítems mencionados en el numeral anterior como: gráficas, tablas, ecuaciones, variables, etc. c. Identificar variables, establecer condiciones válidas para el problema en cuestión, plantear y contrastar hipótesis, tanto en problemas teóricos como en situaciones simuladas. d. Plantear y explorar posibles soluciones ante las temáticas estudiadas en el curso. |
| CIUDADANAS | Formación Social y Ciudadana | Desarrollar la capacidad para: a. Aplicar el conocimiento científico en pro del desarrollo socio cultural de las diferentes comunidades. b. Proponer proyectos alternativos en los que se apliquen los fundamentos de la mecánica estadística en el estudio y solución de problemas de la comunidad, haciendo énfasis en los sistemas biológicos. c. Socializar los resultados y alcances de los proyectos desarrollados en estas temáticas en eventos de carácter local, nacional e internacional. |
| LABORALES | Relaciones Interpersonales | Habilidad para: a. Aportar y complementar a sus grupos de trabajo, conocimientos para solucionar problemas planteados en la mecánica estadística. b. Confrontar y consensuar diferentes puntos de vista, a partir del diálogo argumentado. c. Distribuir y desarrollar tareas considerando diferentes niveles de responsabilidad, individual o grupal. |

| | | |
|--|----------------------------|---|
| | Desarrollo Cultural | Habilidad para: a. Interpretar la idea principal y los argumentos expuestos en un texto en un segundo idioma. b. Diferenciar lenguaje común del lenguaje técnico considerando el sentido y significado físico y matemático de acuerdo con el contexto, desde la perspectiva del idioma del documento (inglés u otros). |
|--|----------------------------|---|

EVALUACION:

La evaluación tendrá un carácter eminentemente formativo, lo cual permite ir retroalimentando los procesos de enseñanza y de aprendizaje; ella será permanente durante el desarrollo del espacio académico, de tal manera que durante el proceso, por una parte, el profesor tenga una apreciación lo más objetiva posible acerca del trabajo y los progresos de los estudiantes y por otra, cada estudiante sea consciente de sus logros y falencias en su proceso formativo, lo que le posibilita adoptar estrategias para superar estas últimas.

El sistema de calificación estará acorde con la reglamentación vigente (Acuerdo 027 de diciembre de 1993 CSU).

BIBLIOGRAFÍA, HEMEROGRAFIA, CIBERGRAFIA GENERAL Y/O ESPECIFICA:

- - Simulating the Physical World, Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics
HJC Berendsen, Cambridge University Press 2007
- Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications
D. Frankel & B. Smit, Academic Press 2002
- Computer Simulation of Biomolecular Systems, Theoretical and Experimental Applications
Ed. W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner & A.J. Wilkinson;
Vol 2 ESCOM 1992 & Vol3 KLUGER/ESCOM 1997
- The Art of Molecular Dynamics Simulation,
D.C. Rapaport, Cambridge University Press 1998
- Molecular Dynamics Simulation Elementary Methods,
J.M. Haile, John Wiley & Sons Inc 1992
- Computer Simualtion of Solids,
M.P. Allen & D.J. Tildesley , Oxford Science Publications 2000
- Computational Statistical Mechanics (Studies in Modern Thermodynamics Series Vol 11)
W.G. Hoover, Elsevier 1991
- Thermodynamics and Kinetics for the Biological Sciences
G.G. Hammes, John Wiley & Sons Inc 2000
- Biological Thermodynamics
D.T. Haynie, , Cambridge University Press 2001
- Towards a Thermodynamic Theory for Ecological Systems
S.E. Jorgensen & Y.M. Svirezhev, Elsevier 2004