Plazo de entrega: 31 de Marzo

Tarea 1

1. De acuerdo con la revista Newsweek de junio 17 de 2002, pag. 27, el porcentaje de sillas vacías en la primera fase del Mundial de Fútbol, está dado por la siguiente tabla:

Año	1990	1994	1998
Porcentaje	18	8.7	10

   a) Utilizando gnuplot, ajuste los datos con un polinomio de orden 2. Mostrar en un gráfico los datos y la función ajustada. NOTA: controlar la condición inicial de los parámetros para realizar un buen ajuste, particularmente del coeficiente del término de orden cero, c.
   b) Grafique la función ajustada hasta el 2005 y determine su valor (predicción) para el año 2002. Esta clase de evaluación se llama extrapolación. No tiene que ofrecer resultados correctos, a menos que haya razones adicionales para tener en cuenta.
   c) La misma revista informa que el porcentaje de sillas vacías en la primera fase del Mundial del 2002, es 22%. ¿Qué tan bueno fue el estimado obtenido en b?
   d) Aumente la tabla con la información para el año 2002. Construya el polinomio interpolante de esta tabla de grado a lo más 3. Mostrarlo en un gráfico.

2. Resolución de ecuaciones de segundo grado.
   Escribir un programa en fortran que toma como entrada tres números reales a, b, y c, e imprima las soluciones de la ecuación cuadrática $ax^2 + bx + c = 0$ diferenciando si son soluciones reales o complejas.

3. Una partícula cae libremente moviéndose en dirección vertical. Comienza con velocidad cero a la altura h. Al llegar al suelo, rebota inelásticamente de modo que $v_y' = -ev_y$ con $0 < e < 1$ un parámetro.
   a) Escriba un programa en fortran para estudiar numéricamente el movimiento de la partícula y estudiar los casos $e = 0.1, 0.5, 0.9, 1.0$. Animar las trayectorias calculadas.
   b) Generalice el programa anterior para que pueda estudiar el caso $\vec{v}_0 = v_{0x}\hat{\imath}$. Animar las trayectorias calculadas.

4. Suponer que tenemos una función $f(x)$ y queremos calcular su derivada en un punto x. Podemos hacerlo con lápiz y papel, si sabemos la forma matemática de la función, o lo podemos hacer en la computadora, haciendo uso de la definición de la derivada:
$$\frac{df}{dx} = \lim_{\delta \to 0} \frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta}$$
   En el computador no podemos tomar el límite cuando δ tiende a cero, pero podemos dar una aproximación razonable haciendo δ pequeño.

   a) Escribir un programa que defina una función $f(x) = \sqrt{x}$, y entonces calcule la derivada de la función en el punto $x = 1$ usando la fórmula anterior con $\delta = 10^{-2}$. Calcular el valor real de la misma derivada analíticamente y comparar con la respuesta que da el programa, ¿cuál es el error relativo?

b) Repita el cálculo para $\delta = 10^{-3}, 10^{-4}, \cdots, 10^{-13}, 10^{-14}$, (con doble precisión) y realizar un gráfico del error relativo en función de δ en escala logarítmica usando gnuplot. ¿qué observa? ¿por qué sucede esto?

5. Para ilustrar la pérdida de dígitos significativos por sustracción de cantidades casi iguales, realizar un programa que calcule
a) $\sqrt{x^2+1}-1$
b) $x - \sin x$
para valores de $x \in [0, 10^{-4}]$. Graficarlos adecuadamente con al menos 20 puntos equidistantes. Disponer los cálculos de manera que, en ambos casos, se evite dicha pérdida y compararlos con el cálculo directo de estas expresiones.

6. El oscilador armónico simple cuántico tiene niveles de energía $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, donde $n = 0, 1, 2, \cdots, \infty$. Como mostraron Boltzmann y Gibbs, la energía media de un oscilador armónico simple a temperatura T es:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\beta E_n}$$

donde $\beta = 1/k_B T$ y $\mathcal{Z} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}$. Queremos calcular, aproximadamente, el valor de $\langle E \rangle$ de una molécula de hidrógeno, H_2, que realiza pequeñas vibraciones alrededor de su equilibrio (y por lo tanto se le puede aproximar como un oscilador armónico simple cuántico). La frecuencia de vibración del H_2 en estas condiciones es de $\omega = 1.3 \times 10^{13}$ rad/s. Considerando una temperatura de $T = 10^4$ K:

a) Escribir un programa que calcule $\langle E \rangle$ con los siguientes rasgos: (i) las constantes como el número de términos y el valor de $\beta\hbar\omega$ se asignan a variables en el inicio del programa, (ii) usar un solo loop para calcular ambas sumas (esto ahorra tiempo, haciendo que el programa se ejecute más rápido), (iii) calcular el exponencial $e^{-\beta E_n}$ una sola vez en cada iteración del loop (esto también ahorra tiempo: exponenciales toman mucho más tiempo que, por ejemplo, adiciones o multiplicaciones).

b) Estudiar la convergencia ejecutando el programa con $N = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$, y 10^9 términos en la suma. ¿Cuál es el resultado entregado en cada caso y qué tiempo se demora en entregarlo? ¿Qué conclusiones puede dar?
En fortran pueden utilizar las siguientes líneas para medir el tiempo:
al inicio:
```
REAL(8)::time1,time2
CALL CPU_TIME(time1)
```
al final:
```
CALL CPU_TIME(time2)
write (6,*) "tiempo de corrida:",time2-time1, " seg"
```

c) Realizar un gráfico de la energía promedio del oscilador armónico simple cuántico como función de la temperatura entre 500 y 10^4 K, cada 500 K. Poner la energía en eV y usar $N = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$. ¿Qué conclusiones puede dar?