

FÍSICA COMPUTACIONAL (F811)

Proyecto final: fecha de entrega 21 de mayo de 2021.

Guatemala, 23 de abril de 2021

Instrucciones: Presentar un informe completo por grupo sobre el desarrollo y la implementación en FORTRAN de su solución. Preparar un único archivo tar.gz para adjuntar todos los archivos usados para elaborar el informe: códigos fuente necesarios para compilar todas las implementaciones. El requisito para calificar el problema es que el código debe compilar sin errores en el clúster euclides.

La distribución del trabajo en el grupo debe ser tal que se puedan hacer por lo menos dos opciones de cada función y el informe debe incluir el análisis (de tiempo y de memoria) realizados para elegir la función con mejor desempeño. Además, el informe debe incluir una sección donde se explique la distribución del trabajo.

Problema 1: Ecuaciones diferenciales parciales (40 puntos)

Escriba una implementación en FORTRAN para el método diferencias finitas para resolver los tres casos:

1. ecuaciones elípticas;
2. ecuaciones parabólicas;
3. ecuaciones hiperbólicas.

Su implementación debe leer las funciones desde el módulo de funciones y los parámetros desde un archivo.

Nota: realice pruebas con funciones sencillas como $f(x) = x$ o $f(x) = \sin(x)$ y agregue a su informe el resultado de estas pruebas.

Problema 2: Caminatas aleatorias (20 puntos)

Escriba una implementación en FORTRAN para una caminata aleatoria y muestre

1. el comportamiento de la distancia recorrida en función del número de pasos realizados en una red 1D infinita;
2. el comportamiento del tiempo de retorno y de la distancia recorrida en función del número de pasos para una red 2D

- a) si las redes son infinitas
- b) si las redes son finitas y con condiciones de frontera abiertas
- c) si las redes son finitas y con condiciones de frontera periódicas en una sola dimensión.

3. **Opcional:** repita el item 2 cambiando la red cuadrada por una red hexagonal.

Problema 3: Optimización numérica con el Método Monte Carlo. (40 puntos)

Escriba una implementación de un código FORTRAN para el método Monte Carlo para encontrar la configuración de mínima energía de un sistema de n cuerpos que están restringidos a moverse sobre la superficie de una esfera. Los n cuerpos son idénticos en masa m y carga q , considere solamente el potencial electrostático generado por los cuerpos.

La evaluación se realizará por partes de la siguiente forma

1. Implementación de los pasos aleatorios. (10 % de la nota del problema).
2. Implementación del cálculo de la energía (10 % de la nota del problema).
3. Implementación del método Monte Carlo (30 % de la nota del problema).
4. Pruebas con $n = 4, 6, 8$ partículas (50 % de la nota del problema).
5. (Opcional) considerar un potencial externo.