Portafolio

Física Computacional II

NOMBRE COMPLETO AUTOR
CARRERA
DEPARTAMENTO
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN

Agosto-Diciembre 2024
Concepción, Chile

Profesor Guía: Dr. Roberto Navarro Maldonado

Índice general

Introducción

Este portafolio deberá incluir evidencias de las actividades desarrolladas en la asignatura de Física Computacional II (510240), dictada en el segundo semestre de 2024 en el departamento de física, facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, de la Universidad de Concepción.

Esta asignatura se enfoca en la resolución de problemas en Física usando métodos numéricos y el lenguaje de programación `python`), contribuyendo a conocimientos generales de construcción y aplicación de algoritmos computacionales, y optimización de simulaciones numéricas. Así, se espera obtener los siguientes resultados de aprendizaje al finalizar este portafolio:

1. Aplicar las herramientas computacionales en la resolución numérica de problemas en Física.
2. Generar programas computacionales apoyándose en algoritmos y conceptos de la física matemática y estadística.
3. Diferenciar, integrar y resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, en forma numérica.

La evaluación se realizará a través de este portafolio, el cual debe ser **entregado mediante un repositorio** de GitHub que será alojado en la organización fiscomp2-UdeC2024 especialmente habilitado para esta asignatura.

1. El repositorio será revisado periódicamente por el profesor o los ayudantes de la asignatura, para poder dar retroalimentación oportuna antes de la entrega oficial al final del curso. Las revisiones parciales se harán al finalizar cada mes, y la fecha estimada de entrega final es el **viernes 29 de noviembre de 2024**. Si el protafolio no tiene avances en cada revisión parcial, puede costar puntaje de la nota final.
2. El portafolio debe contener una sección de conclusiones donde el/la estudiante resumirá los principales logros de este portafolio y autoevaluará su desempeño a través de una reflexión final.

Criterios de evaluación

Como criterios de evaluación, se considerará:

1. Coherencia de las evidencias con las actividades realizadas en clases y la autoevaluación al final del documento.
2. Competencias comunicativas y redacción, especialmente uso correcto de ortografía, gramática, sintaxis, presentación de figuras, uso de elementos de LaTeX y explicación de la parte relevante de scripts de `python`.
3. Presentación del documento: Claridad, limpieza y orden.

Finalmente, este portafolio no solo es una herramienta de evaluación, sino también una oportunidad para que el/la estudiante reflexione sobre su proceso de aprendizaje, consolide sus conocimientos y desarrolle habilidades clave en el ámbito de la computación aplicada a la física. Se espera que este documento sirva como un registro tangible de su progreso y como una muestra de las competencias adquiridas a lo largo del curso, las cuales podrán ser de gran utilidad en futuros desafíos académicos y profesionales.

Información personal y académica

Datos personales

Nombre completo	Loki Laufeyson
Matrícula	XXXXXX
Fecha de Nacimiento	17 de diciembre de 969
Nacionalidad	Asgardiano
E-Mail institucional	loki@asgard.mcu

Breve biografía académica

Soy Loki Laufeyson, estudiante de segundo año de la carrera XXX. La educación media la realicé en el liceo/colegio XXX de la ciudad XXX....

Visión general e interés sobre la asignatura

Resultados esperados de este portafolio

Evidencias de aprendizaje

Capítulo 1

Instrucciones generales

Fecha de la actividad: 10 de septiembre de 2024

Elimine este capítulo de su portafolio. Este capítulo contiene algunas instrucciones generales de presentación de su portafolio.

Las evidencias de aprendizaje en este portafolio consistirán en la entrega de soluciones detalladas a problemas específicos seleccionados durante la asignatura. Para cada evidencia, deberá incluir:

Fecha La fecha en que empezó a escribir el capítulo.

Resumen y objetivos Explique claramente el problema que está resolviendo, especificando los objetivos del mismo y una descripción breve de cómo resolverá el problema. Note que esto **no se refiere al enunciado del problema de una guía**, sino que a un párrafo donde usted debe explicar qué es lo que quiere resolver.

Método de solución Describa cómo resuelve el problema. Por ejemplo, si tiene que demostrar algún esquema numérico, explique el procedimiento para tal demostración; y si va a resolver un problema, indique qué enfoque numérico o algoritmo usará para resolver el problema. En casos donde resuelva un problema de forma numérica, incluya detalles relevantes del código en `python`, destacando aspectos importantes como la elección de esquemas numéricos, el uso de funciones, etc. **No incluya el código completo**, solo la parte más relevante para resolver el problema. Por ejemplo, puede omitir lineas donde importa librerías como `numpy` o `matplotlib`, o líneas donde está configurando un gráfico.

Análisis de resultados Presente y analice los resultados obtenidos. Por ejemplo, en un problema que involucre un esquema de derivadas centradas, discuta los errores numéricos encontrados y su comportamiento, mostrando gráficos o tablas, o citando referencias bibliográficas si es necesario.

Conclusiones Incluya un breve resumen (nuevamente) de lo que se hizo en la actividad y los resultados más importantes. Explique qué aprendió al resolver el problema, incluyendo cualquier dificultad que encontró y cómo la superó. También mencione cómo este problema contribuye a su comprensión de los métodos computacionales en física.

Agradecimientos Si aplica, incluya una breve reseña a las personas que lo ayudaron a resolver esta actividad.

En el capítulo **??** mostramos un ejemplo de un problema simple ya resuelto en clases.

A continuación se presenta una breve guía de elementos que puede usar en LaTeX para cuidar la presentación del mismo:

1.1. Ecuaciones

Dependiendo de su estilo, puede utilizar ecuaciones dentro del texto como $f(x) = \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}$.

1.1.1. Ecuaciones largas

Si la ecuación es larga o es importante (aunque no sea tan larga), debería dedicar una línea solo para esa ecuación. Así, para ecuaciones que son claramente relevantes, debe enumerarlas usando `equation`. Por ejemplo,

$$\exp(i\theta) = \cos(\theta) + i\sin(\theta)\,. \tag{1.1}$$

Si la ecuación es parte de un procedimiento, debe usar `align`. Por ejemplo,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}x^2 \sin x &= \left(\frac{dx^2}{dx}\right)\sin x + x^2\frac{d}{dx}\sin x\,, \\ &= 2x\sin x + x^2\cos x\,. \end{aligned} \tag{1.2}$$

Note el uso de `\nonumber` para eliminar la enumeración de una línea. Note también el uso de puntos y comas en las ecuaciones (**??**) a (**??**).

1.1.2. Referencia a ecuaciones

Puede citar ecuaciones enumeradas, por ejemplo la ecuación de Euler (**??**) es una de las ecuaciones básicas del cálculo complejo. Note que usamos el comando `\eqref{eq:euler}` para citar esta ecuación. Para ello, es necesario dar una etiqueta a la ecuación que quiere citar, para lo cual debe usar `\label`. Note que la etiqueta debería tener un nombre explícito. Por ejemplo, usamos `\label{eq:euler}` porque claramente nos queremos referir a la ecuación de Euler. No tiene sentido que use un número explícito como `\label{eq:1}` porque es muy posible que ese número cambie en el futuro.

De la misma forma, note que podemos hacer referencias a ecuaciones de otros capítulos e, incluso, a un capítulo completo. Por ejemplo, en la sección **??** mostraremos un ejemplo de la solución de un problema numérico.

1.2. Figuras

También puede agregar figuras para explicar mejor sus ideas. Trate de citarlas adecuadamente en el texto, por ejemplo, la figura **??** muestra un ejemplo usado en wikipedia para explicar la electricidad estática **?**.

Figura 1.1: Bolas de poliestireno adheridos al pelaje de un gato debido a la electricidad estática. **?**.

En este caso, citamos la figura usando el comando `\ref{fig:estatica}`. No es una buena práctica tratar de referirse a una figura como “la siguiente figura” porque estas tienden a moverse en el texto para aprovechar mejor los espacios. **NO INTENTE FORZAR LA POSICIÓN DE UNA FIGURA**. O sea, **nunca** use `[H]` para que la figura aparezca donde usted quiere. Deje que la figura sea libre y que LaTeX decida dónde queda mejor. Por ejemplo, es posible que la figura **??** se encuentre en otra página en la compilación de este documento. Pero no importa, porque usted sabe que me estoy refiriendo a la figura **??** y no a otra cosa.

1.3. Códigos

Puede incluir códigos usando el paquete `minted`. Esta librería requiere que el compilador de LaTeX se ejecute con `-flag-escape` para procesar correctamente los colores del código que usted incluya. Si tiene LaTeX instalado localmente en su computador, le recomiendo compilar con:

```
latexmk -pdf -shell-escape portafolio
```

Esto asegura la correcta compilación de todos los elementos del documento, incluyendo referencias cruzadas a figuras y ecuaciones, además de citas bibliográficas. La etiqueta `-pdf` es para compilar el documento en formato PDF.

Para incluir código de python, use la siguiente sintaxis:

```
\begin{pythoncode}
   # código
\begin{pythoncode}
```

Por ejemplo, la siguiente linea muestra cómo calcular la derivada centrada de una serie de puntos `(x[i],y[i])` usando un ciclo `for`:

```python
for i in range(1,y.size-1):
    dy[i] = (y[i+1]-y[i-1]) / (x[i+1]-x[i-1])
```

Para otro tipo de código, reemplace `pythoncode` por `minted`. Vea la documentación de overleaf para más ejemplos.

1.4. Referencias bibliográficas

Al final del documento encontrará una lista de referencias. Esto se logra usando `bibtex` y el archivo `referencias.bib` que se encuentra en el directorio base de este portafolio.

El archivo `referencias.bib` tiene entradas de la forma:

```
@misc{wikistatic,
    author = "{Wikipedia contributors}",
    title = "Static electricity --- {Wikipedia}{,} The Free Encyclopedia",
    year = "2021",
    howpublished = {\url{https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Static...}},
    note = "[Online; accessed 5-November-2021]"
  }
```

En este caso, es una referencia a una página web y es de tipo `@misc`, donde la primera palabra `wikistatic` es la etiqueta que usamos para citar, y las entradas `author`, `title`, etc. son información que `bibtex` usa para formatear la bibliografía al final del documento.

Para citar esta referencia en el texto, usamos el comando `\citep{wikistatic}`. Puede citar más referencias separándolas con comas, por ejemplo `\citep{wikistatic,AF:2003,CEL:arXiv}` que resulta en (???). Note que existen tres comandos disponibles `\cite`, `\citet` y `\citep`. Abajo explico un poco más.

Para compilar este documento (si es que está trabajando localmente en su computador con LaTeX instalado), recomiendo usar el comando `latexmk`:

```
latexmk -pdf -shell-escape portafolio.tex
```

Esto asegura la correcta compilación de todos los elementos del documento, incluyendo referencias cruzadas a figuras y ecuaciones, además de citas bibliográficas. La etiqueta `-pdf` es para compilar el documento en formato PDF, mientras que `-shell-escape` permite usar una librería para el formato de códigos de python insertos en LaTeX.

Si tiene algún problema con la bibliografía, es posible que no tenga algunos elementos instalados (como la librería `texlive-publishers`). Busque en `portafolio.tex` la siguiente línea para diagnosticar el problema:

```
% % bibliografia: descomente estas dos lineas para usar estilo numerico, e.g. [1].
% \usepackage[square,numbers,sort&compress]{natbib}
% \bibliographystyle{apsrev4-1}

% bibliografia: descomente estas dos lineas para usar estilo autor-año, e.g. (Navarro, 2022).
\usepackage[authoryear]{natbib}
\bibliographystyle{aipauth4-1}

...

% lista de referencias guardadas en referencias.bib
\bibliography{referencias}

\end{document}
```

En el texto anterior, `\bibliographystyle` controla el estilo de bibliografía. Por ejemplo,

- El estilo `apsrev4-1` configurado con `square,numbers,sort&compress` resulta resulta en referencias numéricas:

  ```
  \cite{CEL:arXiv}  : [3]
  \citep{CEL:arXiv} : [3]
  \citet{CEL:arXiv} : Cancès et al. [3]
  ```

- El estilo `aipauth4-1` configurado con `authoryear` resulta resulta en referencias autor-año:

  ```
  \cite{CEL:arXiv}  : Cancès, Ehrlacher, and Lelièvre (2012)
  \citep{CEL:arXiv} : (Cancès, Ehrlacher, and Lelièvre, 2012)
  \citet{CEL:arXiv} : Cancès, Ehrlacher, and Lelièvre (2012)
  ```

1.5. Comentarios finales

Note que este archivo se puede compilar independientemente del portafolio. Esto es posible gracias al paquete `subfiles`.

Al principio de este archivo, encuentra la instrucción

```
\documentclass[../portafolio.tex]{subfiles}
```

Esto significa que este archivo hereda los paquetes y algunas configuraciones del archivo principal `../portafolio.tex`.

Para compilar este capítulo y solo este capítulo, puede usar:

```
latexmk -pdf -shell-escape template-instrucciones
```

Es posible que las referencias bibliográficas no se resuelvan bien (puesto que no incluimos `\bibliography{referencias}` en este documento). Además, si cita ecuaciones o figuras de otros capítulos tampoco se resolverán, apareciendo un símbolo como (??). Pero esto no importa, pues la utilidad de esto es solo compilar este documento de forma rápida para diagnosticar como se está viendo este. Una vez este capítulo esté finalizado, puede compilar el portafolio completo y las referencias estarán bien resueltas.

Capítulo 2

Ejemplo de derivada centrada

Fecha de la actividad: 10 de septiembre de 2024

En este capítulo, mostraremos cómo estimar el error de un esquema numérico dado para estimar la derivada de una función real $f(x)$ de argumento real x. En este caso, nos dan una regla de derivación como sigue:

$$f'_{\text{cen}}(x) = \frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h}\,, \tag{2.1}$$

donde $h > 0$ un número real positivo, el cual resulta ser un esquema de derivada centrada de dos puntos. Así, estimaremos el error de truncamiento utilizando expansiones en serie de Taylor de f. Luego, estimaremos el error del esquema numérico debido a errores de redondeo al evaluar f, para finalmente comparar la estimación de estos errores en el caso en que $f(x) = \sqrt{x}$.

2.1. Estimación del error de truncamiento

Si h es lo suficientemente pequeño y si f es suave y continua al rededor de x, entonces asumimos que la siguiente serie de Taylor existe:

$$f(x \pm h/2) = f(x) \pm f'(x)\frac{h}{2} + f''(x)\frac{h^2}{2^2 \cdot 2!} \pm f'''(x)\frac{h^3}{2^3 \cdot 3!} + f^{(4)}(x)\frac{h^4}{2^4 \cdot 4!} + \cdots \tag{2.2}$$

Reemplazando (**??**) en (**??**), encontramos:

$$\begin{aligned} f'_{\text{cen}}(x) &= f'(x) + f'''(x)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!} + f^{(5)}(x)\frac{h^4}{2^4 \cdot 5!} + \cdots\,, \\ &= f'(x) + f'''(\xi)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!}\,, \end{aligned} \tag{2.3}$$

donde hemos usado que, por el teorema del valor medio, se puede asegurar que existe un valor de $x - h/2 \leq \xi x + h/2$ de modo que:

$$f'''(\xi)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!} = f'''(x)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!} + f^{(5)}(x)\frac{h^4}{2^4 \cdot 5!} + \cdots\,. \tag{2.4}$$

Así, según la ecuación (**??**), entonces existe un error del orden $O(h^2)$ entre la derivada analítica $f'(x)$ y su aproximación numérica según la ecuación (**??**).

2.2. Estimación del error de redondeo

Cada vez que evaluamos f, es posible que estemos cometiendo algún error de redondeo. Por ejemplo, al evaluar $f(x \pm h/2)$, en realidad obtengamos una aproximación de esta función dada por

$$\overline{f(x \pm h/2)} = f(x \pm h/2)(1 + \varepsilon_\pm)\,, \tag{2.5}$$

donde $\varepsilon_\pm$ es un error que depende del signo que usemos en $x \pm h/2$. Por lo tanto, según las ecuaciones (**??**) y (**??**), en realidad tenemos:

$$f'(x) = \frac{\overline{f(x+h/2)} - \overline{f(x-h/2)}}{h} - f'''(\xi)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!}\,. \tag{2.6}$$

Usando (**??**) en (**??**) y reordenando, encontramos

$$f'(x) - \frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h} = \frac{f(x+h/2)\varepsilon_+ - f(x-h/2)\varepsilon_-}{h} - f'''(\xi)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!}\,. \tag{2.7}$$

El lado izquierdo de la ecuación (**??**) es simplemente el error absoluto entre $f'(x)$ y su aproximación según (**??**). Luego,

$$E_{\text{abs}} = \left| f'(x) - \frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h} \right|\,, \tag{2.8}$$

$$\leq \left| \frac{f(x+h/2)\varepsilon_+}{h} \right| + \left| \frac{f(x-h/2)\varepsilon_-}{h} \right| + \left| f'''(\xi)\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!} \right|\,, \tag{2.9}$$

donde hemos usado la desigualdad triangular para separar varios términos. Si asumimos que h es lo suficientemente pequeño, entonces podemos aproximar $f(x \pm h/2) \approx f(x)$ y $f'''(\xi) \approx f(x)$. Si además los errores están acotados como $|\varepsilon_\pm| < 2^{-p}$ con p algún valor positivo, entonces

$$E_{\text{abs}} \leq |f(x)|\,\frac{2^{1-p}}{h} + |f'''(x)|\,\frac{h^2}{2^2 \cdot 3!}\,. \tag{2.10}$$

Así, la ecuación (**??**) representa una cota máxima del error como función de x y h, donde el primer término de la derecha está relacionado con el error de redondeo que crece si h decrece, y el segundo término es el error de truncamiento que decrece si h decrece.

2.3. Comparación del error absoluto

Compararemos el error absoluto dados por las ecuaciones (**??**) y (**??**) para la función $f(x) = \sqrt{x}$ en el punto $x = 3$ para distintos valores de h. Para ello, usaremos el siguiente código:

```
df = (f(X+0.5*h) - f(X-0.5*h))/h
plt.loglog(h, np.abs(df - 0.5/f(X)), ".")
plt.loglog(h, np.abs(f(X))*eps/h + (h/8)**2 / f(X)**5)
```

Aquí, $10^{-20} \leq h \leq 0{,}1$ es una lista de 200 valores equiespaciados en escala logarítmica, y `eps=2**(-52)` está relacionado con la cantidad de dígitos binarios que se pueden representar con exactitud en la mantisa en un número flotante de 64 bits.

La figura **??** muestra el error según la ecuación (**??**) con puntos azules, y la cota del error calculado con la ecuación (**??**) con una línea continua naranja, ambos como función de h. Se observa que la línea naranja efectivamente es una cota superior del error absoluto. Como analizamos antes, la línea naranja decrece con h hasta llegar a un mínimo global cerca de $h = 10^{-4}$. En ese rango, el error predominante es debido al error de truncamiento en las series de Taylor. Para valores más pequeos de $h < 10^{-4}$, el error predominante es el de redondeo por parte de la máquina, razón por la que este crece a medida que h decrece. Para valores de $h < 10^{-15}$ hay otros errores probablemente asociados a *underflow* en que h es tan pequeño que el computador no es capaz de estimar o distinguir $f(x+h/2)$ de $f(x-h/2)$.

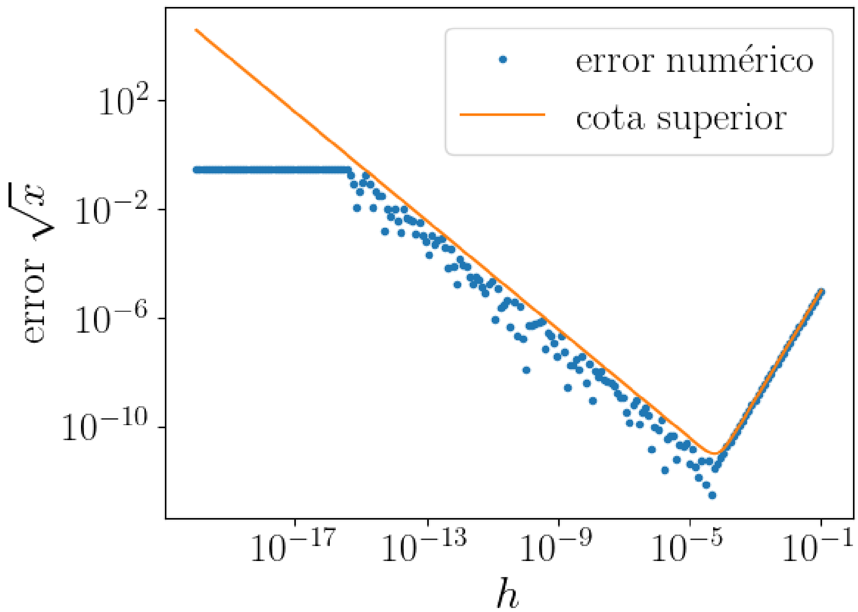

Figura 2.1: Error absoluto según la ecuación (**??**) con puntos azules, y (**??**) con línea continua.

Conclusiones

En esta actividad, analizamos el error de un esquema numérico centrado para la derivada de una función. Encontramos que el error de truncamiento es del orden $O(h^2)$, y que el error de redondeo aumenta cuando h^2 es muy pequeño. La cota combinada que obtuvimos muestra que hay un valor óptimo de hh donde el error total es mínimo, lo cual fue confirmado mediante gráficos comparativos.

Esta actividad me permitió entender mejor cómo interactúan los errores de truncamiento y redondeo en los esquemas numéricos. Aprendí que reducir h^2 indefinidamente no siempre mejora los resultados, y que es necesario balancear ambos tipos de errores para lograr una mejor precisión. Visualizar estos errores en gráficos fue fundamental para comprender su comportamiento.

Agradecimientos

Agradezco a Carolina por ayudarme a encontrar la mayoría de los horrores ortográficos que cometí en la redacción de este capítulo. Agradezco también a mi pato de hule por las intensas y fructíferas conversaciones que me ayudaron a encontrar algunos errores en mis códigos.

Conclusiones

Fecha de presentación: Viernes 29 de noviembre de 2024