Universidad Nacional Mayor de San Marcos Universidad del Perú, Decana de América Facultad de Ciencias Físicas Escuela Académica Profesional de Física Syllabus de física computacional II

Adaptado en el marco de la emergencia sanitaria COVID-19

1. Datos generales de la asignatura.

1.1 Nombre del curso: Física Computacional II

1.2 Código: CF0605

1.3 Año de estudios: Tercer año (quinto semestre)

1.4 Semestre académico: 2022 - I

1.5 Duración: 16 semanas

1.6 Créditos: 04(cuatro) 2h - teoría, 4h - practica

1.7 Modalidad: No presencial (virtual)

1.8 Prerrequisito: Física Computacional I

1.9 Profesor: Erich Víctor Manrique Castillo

1.10 E-mail: emanriquec@unmsm.edu.pe

2. Descripción del curso

El curso de Física Computacional II trata sobre los principios básicos de los métodos computacionales y sus aplicaciones a la solución de diversos problemas físicos. Está diseñado para aplicar los métodos numéricos en la solución de problemas donde no existe la solución analítica o la complejidad de un modelo particular es inviable mediante otros métodos. Sin embargo, esto no excluye que se apliquen los métodos numéricos a resolver problemas que tienen solución analítica, más que todo con fines de validación y comparación. El curso de física computacional es basado en solución de problemas, es decir el grado del progreso del estudiante se mide o se demuestra por su capacidad de resolver problemas físicos mediante métodos numéricos o simulación.

Los diferentes métodos que se estudian en el curso pueden ser fácilmente aplicados a resolver problemas semejantes en cualquier otro campo de las ciencias e ingeniería. El conocimiento y manejo de un lenguaje de programación estructurada como el FORTRAN es requerido.

3. Sumilla

El curso de Física Computacional II trata sobre los métodos numéricos básicos y sus aplicaciones a la solución de diversos problemas físicos. La finalidad del curso es dar a conocer al estudiante los fundamentos en los que se basan los métodos numéricos, enfocados en los temas como hallar raíces de ecuaciones no lineales, solución numérica de ecuaciones diferenciales, análisis del problema de muchos cuerpos, incluyendo métodos Monte Carlo. Estos métodos computacionales serán introducidos mediante aplicaciones específicas a problemas físicos con la finalidad de desarrollar en el estudiante la habilidad computacional y la intuición científica requerida para atacar dichos problemas.

4. Objetivos del curso

El objetivo del curso es que el estudiante desarrolle conocimientos y habilidades básicas para utilizar métodos numéricos para modelar sistemas físicos. El objetivo del curso también es que el estudiante obtenga habilidades para implementar métodos numéricos en Fortran.

Logros de aprendizaje: los objetivos mencionados serán evidenciados en los siguientes resultados de aprendizaje.

Conocimiento y comprensión al concluir el programa el estudiante debe:

- 1. demostrar conocimiento básico de los métodos numéricos
- 2. comprender y utilizar correctamente los principios físicos y las herramientas matemáticas apropiadas para resolver problemas y responder a preguntas
- 3. demostrar habilidades básicas de programación
- 4. demostrar y comprender la aplicabilidad de los métodos numéricos para modelamiento de los sistemas físicos y valorar sus ventajas y desventajas.
- 5. Conocer y entender las bases de los métodos de simulación con dinámica molecular y Monte Carlo

Competencias y habilidades

Al concluir el programa el estudiante debe:

- 1. demostrar habilidades de usar los métodos numéricos para modelizar sistemas físicos a diferentes escalas de tiempo y distancia
- 2. demostrar las habilidades de plantear el modelo matemático apropiado del sistema físico acorde con las condiciones impuestas
- 3. demostrar habilidades para estimar los errores en el uso de los métodos numéricos demostrar habilidades en el diseño de algoritmos y programas simples en Fortran, así como en la visualización y análisis de resultados.

5. Metodología y recursos

La enseñanza virtual se llevará a cabo mediante el uso de la plataforma integrada

Classroom y Meet de Google. En las videoconferencias con Meet (actividad sincrónica) se discutirán los aspectos conceptuales y teóricos del tema; mientras que en el aula virtual Classroom se desarrollara todas las otras actividades inherentes. Las estrategias didácticas para usar son el aprendizaje basado en problemas y el aprendizaje orientado a proyectos, para lo cual se hará uso intensivo de todos los recursos informáticos disponibles.

6. Programa de la asignatura

CONTENIDO DEL TEMA POR SEMANAS

- 1. Introducción al curso: Errores de cálculo. Errores de truncamiento y series de Taylor, Errores de redondeo, Estrategias de minimización de errores de cálculo.
- 2. Interpolación numérica: método de Lagrange, diferencias divididas, Interpolación de Newton hacia adelanta y hacia atrás
- 3. Derivación numérica. Operadores de diferencias finitas, relaciones entre los diferentes esquemas de diferencias finitas, derivación numérica mediante los operadores de diferencias finitas
- 4. Raíces de ecuaciones no lineales: Métodos numéricos de hallar las raíces de ecuaciones, Método de bisecaron, Método de Newton, Método de la secante.
- Solución numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias. Métodos de Euler, Verlet, Runge-Kutta
- 6. Movimiento 1D de un cuerpo en medios con resistencia.
- 7. Simulación del Movimiento de los planetas.
- 8. Examen Parcial (EP)
- 9. Fenómenos oscilatorios. Oscilador armónico, Oscilador amortiguado, péndulo doble
- 10. Método de dinámica molecular: Introducción a la dinámica de muchas partículas, potenciales de interacción, integración numérica de las ecuaciones de Newton.
- 11. Método Monte Carlo. Números aleatorios, Teorema del límite central, Muestreo por importancia, Integración Monte Carlo.

- 12. Modelo del caminante aleatorio. Modelo del caminante aleatorio en 1D, Modelo del caminante aleatorio en 2D, Difusión de átomos.
- 13. Modelo de Ising: Algoritmo de Metrópolis, Sistema de espines en campo magnético
- 14. Modelo de Ising. Simulación de una aleación binaria.
- 15. Exposición individual del problema elegido
- 16. Examen Final (EF)

6. Evaluación

Se asignarán problemas para cada tópico relevante discutido en clase. El alumno escogerá un problema sobre un tema entre los tópicos desarrollados y expondrá su solución en la semana 15.

La nota final (nota promocional mínima es 10.5) se obtendrá de acuerdo con la siguiente fórmula:

$$NF = (EP + EF + NE)/3$$

Donde

NF nota final

EP examen parcial

EF examen final

NE nota de la exposición

7. Bibliografía

- 1. [BE] Benjamin A. Stickler, Ewald Schachinger. Basic Concepts in Computational Physics. Second Edition. Editorial Springer, 2016
- 2. W. Cheney, D. Kincaid. Métodos numéricos y Computación, 2008
- 3. Paul L. DeVries. A First Course in Computational Physics. John Wiley, 1984
- 4. A. Klein, A. Godunov . Introductory Computational Physics, Cambridge University Press, 2006
- 5. H. Gould and J. Tobochnik, An introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical Systems, Addison-Wesley, 1996
- 6. Rubin H. Landau, Manuel J. Paez and Cristian C. Bordeianu. Computational Physics,
- 7. Problem Solving with Computers, John Wiley, and Sons, Inc. 2007
- 8. A. Sorenssen. Elementary mechanics using Python, Springer, 2015
- 9. M. Hhorth-Jensen. Computational Physics, University of Oslo, 2003

10. William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, and William T. Vetterling," Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press