

Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

ASIGNATURA / COURSE TITLE

COMPUTACIÓN AVANZADA

1.1. Código / Course number

16422

1.2. Materia / Content area

Computación Avanzada

1.3. Tipo / Course type

Formación optativa / Elective subject

1.4. Nivel / Course level

Grado / Bachelor (first cycle)

1.5. Curso / Year

3° ó 4°/ 3rd or 4th

1.6. Semestre / Semester

2° / 2nd (Spring semester)

1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también inglés en el material docente / Spanish. English is also used in teaching material.

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es altamente recomendable haber comprendido los contenidos de las asignaturas Computación I y Computación II, de 1° y 2° de Grado. En particular, es conveniente estar familiarizado con los siguientes conceptos:

- Descripción y representación del movimiento de una partícula.
- Integración numérica de las ecuaciones del movimiento.
- Introducción a la computación numérica.
- Sistemas de ecuaciones lineales.



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

- Ajuste y aproximación de funciones.
- Derivada e integración numérica.

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia es obligatoria / Attendance is mandatory

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / Lecturer(s) David Martín y Marero (Coordinador)

Departamento de / Department of Física Aplicada

Facultad / Faculty Ciencias

Despacho - Módulo / Office - Module 606 - 12

Teléfono / Phone: +34 91 497 4021

Correo electrónico/Email: David.MartinyMarero@uam.es

Página web/Website

Horario de atención al alumnado/Office hours: Cita previa mediante correo

electrónico.

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

El objetivo de este último curso de Computación del Grado en Físicas, es la profundización por parte del estudiante en técnicas computacionales troncales y su posterior aplicación a problemas físicos de interés actual, pero adaptados al nivel del Grado. Como consecuencia, el estudiante adquirirá la destreza necesaria para utilizar los ordenadores como una herramienta para abordar y resolver problemas físicos que normalmente no se encuentran en el currículo de Grado o/y que no son resolubles mediante métodos puramente analíticos.

Inicialmente se realizará un repaso de los contenidos más importantes de las asignaturas de Computación I y II, pero introduciendo simultáneamente el lenguaje intérprete Python. Esta introducción aumentará el arsenal de lenguajes de programación disponible por el alumno en comparación con lo aprendido en cursos anteriores, a la vez que reducirá significativamente el tiempo del ciclo de escritura y prueba de los códigos.

Competencias a adquirir por el alumno.

- a) Capacidad para traducir un problema físico de difícil o imposible solución analítica en un problema de Física Computacional resoluble mediante cálculo numérico.
- b) Dominar el tratamiento numérico de datos y ser capaz de presentar e interpretar la información gráficamente (A18).



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

- c) Ser capaz de presentar resultados científicos propios o resultados de búsquedas bibliográficas, tanto a profesionales como a público en general (A17), y tanto de forma escrita como verbal.
- d) Desarrollo de la capacidad de análisis y síntesis (B1).
- e) Toma de decisiones (B8) y habilidad para trabajar de forma autónoma (B13).

1.12. Contenidos del programa / Course contents

- 1. Python
 - 1.1 Fundamentos de Python
 - 1.2 Visual Python; gráficos avanzados y visualización
- 2. Recordatorio de análisis numérico; utilización de Python
 - 2.1 Integración numérica
 - 2.2 Diferenciación numérica
 - 2.3 Solución numérica de ecuaciones lineales y no lineales
 - 2.4 Ecuaciones diferenciales ordinarias
- 3. Resolución de ecuaciones: movimiento del provectil real
 - 3.1 Resistencia del aire en el movimiento unidimensional
 - 3.2 Dos dimensiones y dependencia con la altura; balas de cañón
 - 3.3 Presencia de turbulencias; pelotas a gran velocidad
 - 3.4 Espín y fuerza de Magnus
- 4. Caos a partir del péndulo físico
 - 4.1 Péndulo simple y el método de Euler-Cromer
 - 4.2 Péndulo no lineal, amortiguado y forzado
 - 4.3 Aparición del Caos; Espacio de fases y diagrama de Poincaré
 - 4.4 Atractores extraños y el atractor de Lorenz
 - 4.5 Transformadas de Fourier; discreta y "FFT"
 - 4.6 Métodos espectrales
 - 4.7 Caos examinado en el dominio de frecuencias
- 5. Resolución de ecuaciones: Interacción de dos o más cuerpos
 - 5.1 El Sistema Solar; las leyes de Kepler
 - 5.2 Ley del inverso del cuadrado
 - 5.3 Precesión del perihelio de Mercurio
 - 5.4 Problema de los tres cuerpos
 - 5.5 Resonancias y zanjas de Kirkwood
 - 5.6 Caos e Hyperión
- 6. Métodos Estocásticos
 - 6.1 Generación de números aleatorios
 - 6.2 Paseos aleatorios



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

- 6.3 Difusión
- 6.4 Entropía y la flecha del tiempo
- 6.5 Modelos de crecimiento de cúmulos; Fractales
- 6.6 Curvas de Koch
- 7. El Método de Monte Carlo.
 - 7.1 Integración de Monte Carlo
 - 7.2 Modelo de Ising y teoría del Campo Medio
 - 7.3 Simulación Monte Carlo; Algoritmo de Metrópolis
 - 7.4 Transición de fase de segundo orden en el modelo de Ising
 - 7.5 Transición de fase de primer orden en el modelo de Ising
- 8. Simulaciones de dinámica molecular
 - 8.1 Algoritmo de Verlet
 - 8.2 Potencial de Lennard-Jones
 - 8.3 Condiciones periódicas de frontera
 - 8.4 Transiciones de fase sólido-líquido
- 9. Potenciales y ecuaciones en derivadas parciales elípticas. El problema de las condiciones de contorno
 - 9.1 Ecuación de Laplace; Método de las diferencias finitas
 - 9.2 Métodos de Jacobi, Gauss-Siedel, relajación y sobrerrelajación
 - 9.3 Resolución de la Ecuación de Poisson
 - 9.4 Cálculo del campo magnético de una corriente
 - 9.5 Campo magnético de un solenoide
- 10. Difusión y ecuaciones en derivadas parciales parabólicas. El problema de los valores iniciales
 - 10.1 Ecuación de difusión y transferencia de calor
 - 10.2 Métodos explícitos; Tiempo progresivo y espacio centrado
 - 10.3 Métodos implícitos; Tiempo regresivo y espacio centrado
- 11. Ondas y ecuaciones en derivadas parciales hiperbólicas. Otro problema de valores iniciales
 - 11.1 La ecuación de ondas; caso ideal
 - 11.2 Algoritmo de Crack-Nicolson
 - 11.3 Espectro de frecuencias
 - 11.4 Métodos espectrales
- 12. La Ecuación de Schrödinger
 - 12.1 Unidimensional independiente del tiempo
 - 12.2 Potenciales simétricos y el método del disparo
 - 12.3 Potenciales asimétricos y el método del empalme de soluciones
 - 12.4 Dos y tres dimensiones; Método de variaciones-Monte Carlo
 - 12.5 Unidimensional dependiente del tiempo; métodos directos
 - 12.6 Dos dimensiones; solución mediante "salto de rana"
 - 12.7 Métodos espectrales; el oscilador anharmónico



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

 A Survey of Computational Physics - Introductory Computational Science Landau, R. H., Páez, M. J. and Bordeianu, C. C. Python Multimodal eTextBook

2. Computational Physics with Python Ayars, Eric Libro en línea

3. Computational Physics
Giordano, N. J. and Nakanishi, H.
Pearson Education Inc.

4. Computational Physics
Newman, Mark
CreateSpace Independent Publishing Platform

5. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing.
Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W. T. and Flannery, B. P. Cambridge University Press

2. Métodos docentes / Teaching methodology

Los métodos docentes se basan en la exposición por parte del profesor de una introducción teórica al sistema físico objeto de estudio y la exposición de los algoritmos necesarios para la resolución de los problemas planteados por el sistema. Posteriormente se procede a la clase práctica, consistente en la implementación del algoritmo por parte del estudiante en el ordenador. La asistencia a las clases prácticas es por tanto obligatoria y se evaluará al alumno en relación a la tarea realizada en ellas. Finalmente, el estudiante redactará un informe sobre las prácticas realizadas de cada tema, que podrá incluir la exploración de nuevas ideas.



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

3. Tiempo de trabajo del estudiante* / Student workload

		N° de	Porcentaje
		horas	Torcentaje
Presencial	Clases teóricas	20 h	40% = 60 horas
	Clases prácticas	36 h	
	Actividades de evaluación (controles,	4 h	
	presentaciones, etc.)	4 11	
No presencial	Realización de prácticas de programación	30 h	60% = 90 horas
	Redacción de informes	20 h	
	Estudio semanal (1 horas x 15 semanas)	15 h	
	Preparación de examen	20 h	
	Otros (tutorías, etc)	5 h	
Carga total	de horas de trabajo: 25 horas x 6 ECTS	150 h	

^{*}La distribución del tiempo de trabajo tiene carácter orientativo

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria

- El 70% de la calificación se obtendrá a partir de la evaluación del trabajo diario de las prácticas presenciales programadas en las aulas de informática y el correspondiente informe obligatorio.
- El 30% restante corresponderá a un examen teórico al final del curso.

El estudiante que no realice el 80% de las prácticas programadas, será calificado como "NO EVALUADO"

Convocatoria extraordinaria

- El 50% de la calificación se obtendrá a partir de la evaluación del trabajo diario de las prácticas presenciales programadas en las aulas de informática y el correspondiente informe obligatorio.
- El 50% restante corresponderá a un examen teórico.



Código: 16422

Centro: Facultad de Ciencias Titulación: Grado en Física

Nivel: Grado Tipo: Optativa N° de créditos: 6

Competencias Evaluadas

Estas prácticas evalúan las competencias del alumno en cuanto a la realización de cálculos de forma independiente, el desarrollo de programas de software en un lenguaje relevante para el cálculo científico, el tratamiento numérico de datos y la representación gráfica de resultados y su interpretación. También son evaluadas competencias transversales relativas a la capacidad de análisis y síntesis, de aprendizaje y trabajo autónomo, de puesta en práctica de conocimientos adquiridos y la presentación de resultados en un entorno científico y académico.

El examen teórico evalúa las competencias del alumno en cuanto al conocimiento y comprensión de las leyes y principios fundamentales de la Física Computacional y demás contenidos de la asignatura.

5. Cronograma* / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Tema 1	1	2
2	Tema 2	3	5
2 y 3	Tema 3	5	7
4 y 5	Tema 4	6	8
5 y 6	Tema 5	6	8
7 y 8	Tema 6	7	12
8, 9 y 10	Tema 7	6	8
10 y 11	Tema 8	5	10
11 y 12	Tema 9	3	6
12 y 13	Tema 10	3	6
13	Tema 11	3	6
14 y 15	Tema 12	7	12

^{*}Este cronograma tiene carácter orientativo