

Curso de Física Computacional

Semestre 2020-2

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

M. en C. Abraham Lima Buendía

Facultad de Ciencias - UNAM

21 de enero de 2020



1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

3. Temario oficial

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

1. Presentación del curso

1.1 Objetivos

2. Sobre el curso

3. Temario oficial

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

Objetivos 1

El propósito del curso es enseñar al estudiante las ideas de computabilidad usadas en distintas áreas de la física para resolver un conjunto de problemas modelo.

Objetivos 1

El propósito del curso es enseñar al estudiante las ideas de computabilidad usadas en distintas áreas de la física para resolver un conjunto de problemas modelo.

A partir de planteamientos analíticos se pretende obtener resultados numéricos reproducibles consistentes, y que predigan situaciones físicas asociadas al problema bajo estudio.

Objetivos 2

El alumno debe asimilar las ideas básicas del análisis numérico, como son las de estabilidad en el cálculo y la sensibilidad de las respuestas a las perturbaciones en la estructura del problema.

Objetivos 3

El curso también le dará al estudiante capacidad de juicio sobre la calidad de los resultados numéricos obtenidos.

Objetivos 4

En particular se hará énfasis en la confiabilidad de los resultados respecto a los errores tanto del algoritmo de solución como de las limitaciones numéricas de la computadora.

Objetivos 4

En particular se hará énfasis en la confiabilidad de los resultados respecto a los errores tanto del algoritmo de solución como de las limitaciones numéricas de la computadora.

Esta capacidad se adquirirá a lo largo del curso comparando resultados numéricos con otros tipos de análisis, en las regiones en las cuales se pueden llevar ambos a cabo.

Objetivos 5

Por otra parte permitirá al estudiante explorar regiones de comportamiento físico sólo accesibles al cálculo numérico.

1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

2.1 Lugar y horario

2.2 Metodología de Enseñanza

2.3 ¿Programación?

3. Temario oficial

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

Lugar y horario

Lugar: Laboratorio de Enseñanza en Cómputo de Física, Edificio Tlahuizcalpan.

Horario: Martes y Jueves de 18 a 21 horas.

Antes de la clase.

Para facilitar la discusión en el aula, el alumno revisará antes de la clase el material de trabajo que se le proporcionará oportunamente, de tal manera que ya llegará a la misma conociendo el tema a desarrollar durante la clase.

Antes de la clase.

Para facilitar la discusión en el aula, el alumno revisará antes de la clase el material de trabajo que se le proporcionará oportunamente, de tal manera que ya llegará a la misma conociendo el tema a desarrollar durante la clase.

Aviso importante

Daremos por entendido de que el alumno realizará la lectura y/o actividades.

Durante la clase.

Se dará un tiempo para la exposición con diálogo y discusión del material de trabajo con los temas a cubrir durante el semestre. Se busca que sea un curso práctico por lo que se va a trabajar con los equipos de cómputo del laboratorio, de tal manera que habrá ejercicios para desarrollar durante la clase.

Durante la clase.

Un curso de este tipo requiere que el alumno le de solución a problemas mediante un algoritmo computacional, de tal forma que va a requerir “ejecutar” su algoritmo para verificar la funcionalidad del mismo, así como revisar la congruencia de la solución.

Durante la clase.

Considere que el curso no está enfocado al desarrollo de habilidades y/o técnicas de programación con un lenguaje en particular. En un primer momento se revisará un planteamiento general de la solución, para posteriormente, implementarlo en la sintaxis del lenguaje python.

Durante la clase.

Si cuentan con una experiencia previa en programación (con cualquier lenguaje), será conveniente para el trabajo en clase; pero si no han programado, se verán en la necesidad de dedicarle más tiempo tanto para revisar los materiales adicionales, así como para resolver los problemas y ejercicios.

Herramienta de programación

Será necesario utilizar una herramienta computacional para resolver ejercicios y problemas que se revisen en clase.

Usaremos el lenguaje de programación `python` dada su versatilidad y facilidad de manejo.

Herramienta de programación

Las técnicas de programación que vayan adquiriendo serán el reflejo de su trabajo fuera de clase. En caso de no trabajar o dedicarle el tiempo al curso, se complicará bastante, situación que esperamos no se presente.

Guías adicionales de apoyo.

Se han elaborado guías de apoyo complementarias para la consulta tanto de los conceptos principales de la física involucrada en el problema, así como de programación con `python`.

Guías adicionales de apoyo.

De esta manera tendrán una referencia adicional, por su cuenta deberán consultar otros materiales para complementar y conceptualizar el problema así como su solución.

¿Programación?

La solución de un problema requiere en un primer paso: realizar una abstracción del mismo, es decir, debemos de plantear el problema físico, a un problema que permita ser resuelto numéricamente mediante un algoritmo.

¿Programación?

El algoritmo que se proponga como solución, en un segundo paso deberá “ejecutarse” por lo que debemos de revisar la solución, además de la congruencia de la misma con la física y sobre todo, el margen de error que devuelve la solución numérica.

¿Programación?

El curso de Física Computacional **NO** es un curso de programación bajo algún lenguaje en particular.

Es altamente recomendable que cuenten con conocimientos de programación básicos en algún lenguaje o software.

Ya se programar!!

Cuentan con la completa libertad de elegir el lenguaje o software para trabajar durante el curso:

- Fortran
- Java
- C++
- C
- Delphi
- Wolfram
- Mathematica
- Maple
- Matlab
- Scilab
- Octave

Ya se programar!!

Si es el caso que ya programen con algún otro lenguaje o software, deberán de entregar su código fuente y el archivo ejecutable.

Software para el curso

Usaremos dentro del curso la suite [Anaconda](#), que es de distribución libre y contiene una serie de herramientas y programas con lo que programar con [python](#), será una tarea más sencilla.

La suite incluye un *entorno de desarrollo*, terminales, sistema de debug y de consulta.

Como es multiplataforma, se puede utilizar en entornos linux, iOS y Windows. En los equipos del laboratorio tienen instalado Linux y la distribución es Fedora.

Tema 0: Breve introducción a python.

En el curso utilizaremos `python` para programar, se dará un curso muy breve de programación básica, este tema que no será evaluado ni formará parte de la calificación final.

Tema 0: Breve introducción a python.

Tendremos con el Tema 0, un panorama general del uso del lenguaje, pero NO debemos de confiarnos y pensar que con esto, ya podremos programar con facilidad, mientras más práctica tengan, poco a poco mejorarán sus técnicas de programación.

Pueden traer una laptop para el trabajo en el curso, no es requisito, ya que tenemos equipos suficientes en el laboratorio.

Se recomienda que cuenten en sus equipos con el mismo software, las guías que hemos comentado, les brindarán la información para instalar los programas.

Después de la clase.

El curso requiere que le dediquen al menos el mismo número de horas de trabajo en casa, es decir:

Después de la clase.

El curso **requiere que le dediquen al menos el mismo número de horas de trabajo en casa**, es decir:

Dedicación al curso

Les va a demandar al menos seis horas de trabajo como mínimo.

Si cuentan con una experiencia en programación, tienen un paso adelantado, pero si no han programado, se verán en la necesidad de dedicarle más tiempo.

1. Presentación del curso
2. Sobre el curso
3. Temario oficial
 - 3.1 Contenido del temario
4. Evaluación del curso
5. Notas importantes

Temario del curso

Llevaremos el temario oficial del curso, que está disponible en la página de la Facultad - Temario -, haciendo un ajuste en el orden de los temas, siendo entonces:

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

① Introducción.

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

- ① Introducción.
- ② Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

- ① Introducción.
- ② Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- ③ Dimensiones y escalas.

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

- ① Introducción.
- ② Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- ③ Dimensiones y escalas.
- ④ Errores numéricos y su amplificación.

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

- ① Introducción.
- ② Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- ③ Dimensiones y escalas.
- ④ Errores numéricos y su amplificación.
- ⑤ Condición de un problema y estabilidad de un método.

Tema 2: Operaciones matemáticas básicas

- 1 Interpolación y extrapolación.

Tema 2: Operaciones matemáticas básicas

- ① Interpolación y extrapolación.
- ② Diferenciación numérica.

Tema 2: Operaciones matemáticas básicas

- ① Interpolación y extrapolación.
- ② Diferenciación numérica.
- ③ Integración numérica.

Tema 2: Operaciones matemáticas básicas

- ① Interpolación y extrapolación.
- ② Diferenciación numérica.
- ③ Integración numérica.
- ④ Evaluación numérica de soluciones.

Tema 3: Ecuaciones diferenciales ordinarias

① Métodos simples.

Tema 3: Ecuaciones diferenciales ordinarias

- ① Métodos simples.
- ② Métodos implícitos y de multipasos.

Tema 3: Ecuaciones diferenciales ordinarias

- ① Métodos simples.
- ② Métodos implícitos y de multipasos.
- ③ Métodos de Runge-Kutta.

Tema 3: Ecuaciones diferenciales ordinarias

- ① Métodos simples.
- ② Métodos implícitos y de multipasos.
- ③ Métodos de Runge-Kutta.
- ④ Estabilidad de las soluciones.

Tema 3: Ecuaciones diferenciales ordinarias

- ① Métodos simples.
- ② Métodos implícitos y de multipasos.
- ③ Métodos de Runge-Kutta.
- ④ Estabilidad de las soluciones.
- ⑤ Orden y caos en el movimiento de dos dimensiones.

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

- ① Inversión de matrices y número de condición.

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

- ① Inversión de matrices y número de condición.
- ② Valores propios de matrices tridiagonales.

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

- ① Inversión de matrices y número de condición.
- ② Valores propios de matrices tridiagonales.
- ③ Discretización de la ecuación de Laplace y métodos iterativos de solución.

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

- ① Inversión de matrices y número de condición.
- ② Valores propios de matrices tridiagonales.
- ③ Discretización de la ecuación de Laplace y métodos iterativos de solución.
- ④ Solución numérica de ecuaciones diferenciales elípticas en una y dos dimensiones.

Tema 5: Problemas clásicos y cuánticos de valores propios

- 1 Algoritmo de Numerov.

Tema 5: Problemas clásicos y cuánticos de valores propios

- ① Algoritmo de Numerov.
- ② Integración de problemas con valores en la frontera.

Tema 5: Problemas clásicos y cuánticos de valores propios

- ① Algoritmo de Numerov.
- ② Integración de problemas con valores en la frontera.
- ③ Formulación matricial para problemas de valores propios.

Tema 5: Problemas clásicos y cuánticos de valores propios

- ① Algoritmo de Numerov.
- ② Integración de problemas con valores en la frontera.
- ③ Formulación matricial para problemas de valores propios.
- ④ Formulaciones variacionales.

Tema 6: Simulación computacional

- ① Método de Monte Carlo.

Tema 6: Simulación computacional

- ① Método de Monte Carlo.
- ② Dinámica molecular.

Tema 6: Simulación computacional

- ① Método de Monte Carlo.
- ② Dinámica molecular.
- ③ Otros algoritmos de simulación.

Tema 6: Simulación computacional

- ① Método de Monte Carlo.
- ② Dinámica molecular.
- ③ Otros algoritmos de simulación.
- ④ Aplicación a problemas de física de interés actual.

Tema 7: Ecuaciones de evolución

- ① La ecuación de ondas y su discretización en diferencias finitas. Criterio de Courant.

Tema 7: Ecuaciones de evolución

- ① La ecuación de ondas y su discretización en diferencias finitas. Criterio de Courant.
- ② La ecuación de Fourier para el calor y su discretización en diferencias finitas. Estabilidad del esquema.

1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

3. Temario oficial

4. Evaluación del curso

4.1 Evaluación

5. Notas importantes

Se distribuye de la siguiente manera:

- ① Ejercicios en clase 10 %

Se distribuye de la siguiente manera:

- ① Ejercicios en clase 10 %
- ② Tareas 50 %

Se distribuye de la siguiente manera:

- ① Ejercicios en clase 10 %
- ② Tareas 50 %
- ③ Exámenes en salón 40 %

Ejercicios en clase 10%

Durante la clase se trabajarán ejercicios, algunos de ellos se dejarán para que completen la solución, de tal forma que deberán de entregarlo resuelto para la siguiente sesión.

Ejercicios en clase 10%

Para que el ejercicio resuelto se considere dentro de este porcentaje, se requiere que el alumno asista a la clase, en caso de que el alumno no asista y se entere del ejercicio, solamente se le revisará el ejercicio que entregue, pero no se le tomará en cuenta para el porcentaje, (moraleja: hay que asistir a clase).

Tareas 50%

Serán tres tareas durante el curso, se les proporcionará de manera adelantada y con fecha de entrega definida, no se recibirán tareas extemporáneas.

Tareas 50%

Serán tres tareas durante el curso, se les proporcionará de manera adelantada y con fecha de entrega definida, no se recibirán tareas extemporáneas.

Para que la tarea se considere, deberá de entregar el 100% de los ejercicios resueltos. En caso contrario, sólo se revisarán los ejercicios, pero no se tomará en cuenta como parte de la calificación por tareas.

Trabajo en equipo

Podrán reunirse y colaborar para discutir, debatir, proponer y bosquejar la solución a los ejercicios de las tareas.

En el dado caso de encontrar códigos idénticos, se cancelarán no sólo los ejercicios tipo copy-paste, sino la tarea completa del(los) alumnos involucrados.

Exámenes 40%

Habrán tres exámenes en clase, de tipo teórico-prácticos. Se indicará oportunamente el día del examen y los temas correspondientes, que se resolverán y entregarán durante la clase.

Se aplicarán en el aula de cómputo y el trabajo será individual.

Reposición de un examen

Considerando que sólo habrá tres exámenes en el semestre, se considera la posibilidad de presentar una única reposición si y sólo si se cumplen los siguientes puntos:

Condiciones para la reposición de examen

- 1 Se presentaron los tres exámenes parciales.

Condiciones para la reposición de examen

- ① Se presentaron los tres exámenes parciales.
- ② Se entregaron las tres tareas del curso.

Condiciones para la reposición de examen

- ❶ Se presentaron los tres exámenes parciales.
- ❷ Se entregaron las tres tareas del curso.
- ❸ Sólo en un examen parcial se obtuvo una calificación no aprobatoria, es decir, que la calificación del examen parcial sea menor a 6 (seis).

Calificación para aprobar el curso

En caso de contar con un promedio final aprobatorio, es decir, una calificación mayor o igual a 6 (seis) del curso con los tres exámenes parciales aprobados, las tres tareas entregadas y el porcentaje de ejercicios en clase, **no aplica una reposición de algún examen** para subir el promedio final del curso.

El examen final del curso se presentará si y sólo si:

- ① Se presentaron los tres exámenes parciales.

El examen final del curso se presentará si y sólo si:

- ① Se presentaron los tres exámenes parciales.
- ② Se entregaron las tres tareas del curso.

El examen final del curso se presentará si y sólo si:

- ① Se presentaron los tres exámenes parciales.
- ② Se entregaron las tres tareas del curso.
- ③ Hay dos exámenes parciales (o los tres exámenes) con calificación menor a seis.

Aplicación del examen final

De acuerdo al Reglamento General de Estudios Profesionales de la UNAM, habrá dos rondas para presentar el examen final, si en la primera de ellas no se acredita el examen, será posible presentarlo en una segunda y última ronda.

Aplicación del examen final

De acuerdo al Reglamento General de Estudios Profesionales de la UNAM, habrá dos rondas para presentar el examen final, si en la primera de ellas no se acredita el examen, será posible presentarlo en una segunda y última ronda.

Se aclara lo siguiente: **para tener derecho al segundo examen, se debe de presentar necesariamente el primero.**

Calificación del examen final

La calificación obtenida en el examen final, es la que se asentará en el acta de calificaciones del curso de Física Computacional.

Calificación del examen final

La calificación obtenida en el examen final, es la que se asentará en el acta de calificaciones del curso de Física Computacional.

Esta calificación no se promediará con las tareas ni con los ejercicios de clase.

Calificación del examen final

La calificación obtenida en el examen final, es la que se asentará en el acta de calificaciones del curso de Física Computacional.

Esta calificación no se promediará con las tareas ni con los ejercicios de clase.

Si la calificación final obtenida es no aprobatoria (menor a 6), se asentará en el acta **5, (cinco)**

¿En qué caso tendría NP o 5?

En caso de haber presentado al menos un examen parcial y/o haber entregado al menos una tarea, y no se tenga calificación de los demás exámenes, así como de las otras tareas, se promediarán los exámenes y tareas, por lo que el promedio no sería aprobatorio, y se asentaría en el acta: 5, (cinco)

¿En qué caso tendría NP o 5?

Sólo se asentará en el acta de calificaciones NP si el(la) alumno(a) inscrito al curso, no entrega tarea alguna y no presenta algún examen. (¿?)

Más importante

De acuerdo al Reglamento General de Exámenes de la UNAM, se considera una calificación aprobatoria aquella que sea mayor o igual a 6 seis.

Más importante

- ① No “se guardan calificaciones”.

Más importante

- ① No “se guardan calificaciones”.
- ② No se renuncia a una calificación.

1. Presentación del curso
2. Sobre el curso
3. Temario oficial
4. Evaluación del curso
5. Notas importantes
 - 5.1 Consideraciones importantes
 - 5.2 Fechas importantes

Consideraciones importantes 1

- 1 El cupo para el curso es de 25 alumnos.

Consideraciones importantes 1

- ① El cupo para el curso es de 25 alumnos.
- ② Se le dará prioridad en la inscripción a los alumnos que están cursando regularmente la carrera, es decir, alumnos que están inscritos en el séptimo semestre.

Consideraciones importantes 1

- ❶ El cupo para el curso es de 25 alumnos.
- ❷ Se le dará prioridad en la inscripción a los alumnos que están cursando regularmente la carrera, es decir, alumnos que están inscritos en el séptimo semestre.
- ❸ Si consideran quedarse en el curso y se les firma la tira de materias, entendemos que completarán en el curso, si quieren revisar otras opciones de horarios o profesores, se les pide amablemente no requieran la firma, para darle oportunidad a quienes ya están seguros de llevar el curso.

Consideraciones importantes 2

- ④ Si alguien desea participar como oyente sin inscripción, podrá hacerlo siempre y cuando haya espacio de trabajo o traiga laptop, pero NO se guardarán calificaciones.

Consideraciones importantes 2

- ④ Si alguien desea participar como oyente sin inscripción, podrá hacerlo siempre y cuando haya espacio de trabajo o traiga laptop, pero NO se guardarán calificaciones.
- ⑤ Les pedimos gentilmente que revisen detalladamente la organización de sus horarios, para evitar empalmes con otras asignaturas, el curso de Física Computacional les exigirá la atención y trabajo necesarios.

Fechas importantes

- ① Lunes 27 de enero. Inicio del semestre 2020-2.

Fechas importantes

- ① Lunes 27 de enero. Inicio del semestre 2020-2.
- ② Del lunes 6 al viernes 10 de abril, Semana Santa.

Fechas importantes

- ① Lunes 27 de enero. Inicio del semestre 2020-2.
- ② Del lunes 6 al viernes 10 de abril, Semana Santa.
- ③ Viernes 22 de mayo. Fin de Semestre.

Fechas importantes

- ④ Del 25 al 29 de mayo, primera semana de finales.

Fechas importantes

- ④ Del 25 al 29 de mayo, primera semana de finales.
- ⑤ Del 1 al 5 de junio, segunda semana de finales.