

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

31 de julio de 2012

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas importantes

Contenido

- 1 Objetivos
- 2 Lugar y horario
- 3 Metodología de Enseñanza
- 4 ¿Programación?
- 5 Temario
- 6 Bibliografía
- 7 Evaluación
- 8 Fechas 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. 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. El curso también le dará al estudiante capacidad de juicio sobre la calidad de los resultados numéricos obtenidos.

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

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 el material de trabajo que se le proporcionará oportunamente, de tal manera que ya llegará conociendo el tema a desarrollar a la clase. Damos por entendido de que el alumno realizará la lectura.

Durante la clase

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

Programación?

El planteamiento de los algoritmos y la solución de un problema, se expondrá de manera general, propiamente **NO es un curso de programación bajo algún lenguaje en particular**, es importante que cuenten con conocimientos de programación básicos en algún lenguaje común.

Lo que usaremos en el curso

En el curso utilizaremos Python para programar, se dará un breviario de programación con Python básico.

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

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

Para la ejecución de los algoritmos con códigos de Python, será necesario usar un editor de texto, pueden elegir el de su gusto y preferencia, para aprovechar al máximo la integración de herramientas, usaremos en el curso: Spyder2.

Además será necesario usar software para graficación de datos, para ello usaremos gnuPlot, pero igual pueden usar el que ya conozcan y manejen bien.

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

Deberán de configurar en su equipo, ya sea en Linux o en Windows, la paquetería necesaria afortunadamente está disponible de manera libre, es decir, es software GNU.

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

Tema 1: Escalas, condición y estabilidad

- ➊ Introducción.
- ➋ Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- ➌ Dimensiones y escalas.
- ➍ Errores numéricos y su amplificación.
- ➎ Condición de un problema y estabilidad de un método.

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

Bibliografía

- Kahaner, D., Moler, C., Nash, S., 1989, Numerical methods and software, Prentice Hall, USA.
- Klein, A., Godunov, A. Introductory Computational Physics. Cambridge University Press. 2006.
- Gould, H., Tobochnik, J., 1988, An introduction to computer simulation methods: Applications to physical systems, Addison Wesley Publishing Company, USA.
- Vesely, F., 1994, Computational physics: An introduction, Plenum Press, USA.
- Rojas, J.F., Morales, M.A., Rangel, A., Torres, I. Física computacional: una propuesta educativa. Revista Mexicana de Física E 55 (1) 97–111, Junio 2009.
- Janert, P. K. Gnuplot in action. Understanding data with graphs. Manning Publications Co. 2010.
- Mejía, C.E., Restrepo, T., Trefftz, C. LAPACK, una colección de rutinas para resolver problemas de álgebra lineal numérica. Universidad Eafit, julio-septiembre, número 123, Universidad Eafit, Medellín, Colombia, pp. 73-80. 2001.

Se distribuye de la siguiente manera:

- **Ejercicios en clase 20 %:** para tener derecho a este porcentaje se requiere estar presente en la clase, es decir, el ejercicio se entregará en la clase o se dejará para la siguiente, en caso de que no asistan y se enteren del ejercicio, se les revisará el trabajo que entreguen, pero no se les tomará en cuenta para el porcentaje, (moraleja: hay que asistir a clase)

- **Tareas 20 %** : Una tarea por tema, se les proporcionará de manera adelantada y con fecha de entrega definida, no se reciben tareas extemporáneas, ni por correo.
- **Ejercicios 10 %** : Con la finalidad de que practiquen fuera de la clase, se dejará una lista de ejercicios (que servirán como tipo para el examen parcial), si se entregan todos los ejercicios y obtienen una calificación aprobatoria en cada lista, se les tomará en cuenta para su promedio final, en caso de que no se entreguen los ejercicios, no hay inconveniente alguno.
- **Exámenes 50 %** : Uno por tema, de tipo teóricos-prácticos.

No habrá reposiciones de exámenes parciales.

Para tener derecho al examen final: se deberán de haber presentado todos los exámenes parciales y haber entregado todas las tareas del curso. Habrá dos rondas de examen final, si en la primera de ellas no se acredita el examen, será posible presentarlo en una segunda y última ronda.

En caso de haber presentado al menos un examen parcial o haber entregado al menos una tarea, y el promedio final sea menor a 6, la calificación final que se asentará en el acta, será 5. No hay renunciaciones a calificaciones.

Fechas importantes

- 6 de agosto. Inicio del semestre.
- jueves 1 de noviembre, día feriado.
- 23 de noviembre. Fin de Semestre.
- 26 al 30 de noviembre, primera semana de finales.
- 3 al 7 de diciembre, segunda semana de finales.