Curso de Física Computacional

Semestre 2020-2

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

M. en C. Abraham Lima Buendía

Facultad de Ciencias - UNAM

20 de febrero de 2020





1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

3. Temario oficial

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

Contenido 20 de febrero de 2020 2 / 72

- 1. Presentación del curso
 - 1.1 Objetivos

2. Sobre el curso

Temario oficial

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

Presentación del curso 20 de febrero de 2020

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.

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.

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.

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.

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

obre el curso 20 de febrero de 2020 9

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.

Anaconda

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.

Opcionales

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.

Reglas dentro del aula de clase

Habrá que seguir una serie de puntos tanto académicos como "administrativos" dentro del aula de clase para un buen desenvolvimiento y tener una clase amena.

Puntos académicos

Consideren los siguientes puntos:

• La clase inicia a las 6 pm.

Puntos académicos

Consideren los siguientes puntos:

- La clase inicia a las 6 pm.
- Se utilizarán los equipos de cómputo del laboratorio.

Puntos académicos

Consideren los siguientes puntos:

- La clase inicia a las 6 pm.
- Se utilizarán los equipos de cómputo del laboratorio.

Puntos académicos

Consideren los siguientes puntos:

- La clase inicia a las 6 pm.
- 2 Se utilizarán los equipos de cómputo del laboratorio.
- A la segunda llamada de aviso, se cancelará la

31 / 72

Puntos administrativos

En lo que corresponde a la parte administrativa:

 No se permite el consumo de alimentos y/o bebidas dentro del aula.

Puntos administrativos

En lo que corresponde a la parte administrativa:

- No se permite el consumo de alimentos y/o bebidas dentro del aula.
- 2 Se solicita dejen en modo silencioso el celular.

Puntos administrativos

En lo que corresponde a la parte administrativa:

- No se permite el consumo de alimentos y/o bebidas dentro del aula.
- Se solicita dejen en modo silencioso el celular.
- Se En caso de alguna eventualidad, se atenderán los protocolos de seguridad.

Trabajo durante la clase

Los alumnos del curso contarán con una cuenta de acceso a los equipos.

Trabajo durante la clase

Los alumnos del curso contarán con una cuenta de acceso a los equipos.

El uso y manejo de cada equipo pasa a ser responsabilidad de cada alumno. En caso de que algún periférico no funcione debidamente, se les pide lo reporten para que se solicite al área respectiva, su reparación o reemplazo.

Metodología de Enseñanza - 3

Después de la clase.

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

Metodología de Enseñanza - 3

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.

Metodología de Enseñanza - 3

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.

Apoyo con la plataforma Edmodo

Hoy en día es necesario contar con el apoyo de herramientas TIC's, la plataforma Edmodo brinda los elementos necesarios que servirán de apoyo para el curso.

La plataforma permite:

1 Comunicación sincrónica y asincrónica.

La plataforma permite:

- Comunicación sincrónica y asincrónica.
- 2 Flexibilidad de horarios.

La plataforma permite:

- Comunicación sincrónica y asincrónica.
- Plexibilidad de horarios.
- 3 Aprendizaje colaborativo.

La plataforma permite:

- Comunicación sincrónica y asincrónica.
- Plexibilidad de horarios.
- Aprendizaje colaborativo.
- Construcción del conocimiento constante, dinámica y compartida.

La plataforma Edmodo

Dentro de Edmodo se tendrán disponibles las notas del curso, los materiales adicionales de consulta, y servirá como medio de entrega para las actividades tales como ejercicios y tareas.

La plataforma Edmodo

Considera que para la entrega de una actividad, se programa tanto la fecha como hora de entrega, una vez que se alcanza la hora definida, la plataforma ya no permitirá la carga de archivos.

La plataforma Edmodo

Considera que para la entrega de una actividad, se programa tanto la fecha como hora de entrega, una vez que se alcanza la hora definida, la plataforma ya no permitirá la carga de archivos.

No se recibirán las actividades que se envíen por correo electrónico. La plataforma será el canal de comunicación.

1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

- 3. Temario oficial
 - 3.1 Contenido del temario

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

Temario oficial 20 de febrero de 2020 40 / 72

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:

41 / 72

Introducción.

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

- Introducción.
- Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- Oimensiones y escalas.

- Introducción.
- Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- Oimensiones y escalas.
- 4 Errores numéricos y su amplificación.

- Introducción.
- Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes.
- Oimensiones y escalas.
- Trrores numéricos y su amplificación.
- 6 Condición de un problema y estabilidad de un método.

• Interpolación y extrapolación.

- Interpolación y extrapolación.
- 2 Diferenciación numérica.

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

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

Métodos simples.

- Métodos simples.
- Métodos implícitos y de multipasos.

- Métodos simples.
- Métodos implícitos y de multipasos.
- Métodos de Runge-Kutta.

- Métodos simples.
- Métodos implícitos y de multipasos.
- Métodos de Runge-Kutta.
- Estabilidad de las soluciones.

- Métodos simples.
- Métodos implícitos y de multipasos.
- Métodos de Runge-Kutta.
- Estabilidad de las soluciones.
- 6 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

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

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

- Inversión de matrices y número de condición.
- Valores propios de matrices tridiagonales.
- Oiscretización de la ecuación de Laplace y métodos iterativos de solución.

Tema 4: Análisis numérico de problemas matriciales

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

Algoritmo de Numerov.

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

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

- Algoritmo de Numerov.
- Integración de problemas con valores en la frontera.
- Se Formulación matricial para problemas de valores propios.
- Formulaciones variacionales.

Método de Monte Carlo.

- Método de Monte Carlo.
- 2 Dinámica molecular.

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

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

Tema 7: Ecuaciones de evolución

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

Tema 7: Ecuaciones de evolución

- 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.

Sobre el contenido del curso

Como se ha revisado en el contenido de cada tema, vamos a considerar que ya cuentan con una formación correspondiente al sexto semestre de la carrera de Física.

Sobre el contenido del curso

Como se ha revisado en el contenido de cada tema, vamos a considerar que ya cuentan con una formación correspondiente al sexto semestre de la carrera de Física.

Por lo que en cada ejercicio o problema, el análisis y formalización de una expresión matemática se dará por hecho, así como su correspondiente solución analítica.

Sobre el contenido del curso

El alumno deberá de corroborar el planteamiento para el abordaje y solución de un problema de la física, considerando que está cursando el séptimo semestre de la carrera.

1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

3. Temario oficial

- 4. Evaluación del curso
 - 4.1 Evaluación

5. Notas importantes

Evaluación del curso 20 de febrero de 2020 51 / 72

Evaluación

Se distribuye de la siguiente manera:

lacktriangle Ejercicios en clase lacktriangle

Evaluación

Se distribuye de la siguiente manera:

- f 0 Ejercicios en clase $f 10\,\%$
- $\mathbf{2}$ Tareas $\mathbf{50}\,\%$

Evaluación

Se distribuye de la siguiente manera:

- f 0 Ejercicios en clase ${f 10\,\%}$
- f 2 Tareas $f 50\,\%$
- $oldsymbol{3}$ Exámenes en salón $oldsymbol{40}\,\%$

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 $40\,\%$

Habrá 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, correspondiente a los temas que conforman ese examen parcial, si y sólo si se cumplen los siguientes puntos:

Condiciones para la reposición de examen

• Se presentaron los tres exámenes parciales.

Condiciones para la reposición de examen

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

Condiciones para la reposición de examen

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

Examen final

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

• Se presentaron los tres exámenes parciales.

Examen final

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

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

Examen final

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

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

• No "se guardan calificaciones".

Más importante

- No "se guardan calificaciones".
- 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

Notas importantes 20 de febrero de 2020 68 /

1 El cupo para el curso es de 25 alumnos.

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

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

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.

- 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.
- S 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.

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

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

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

Oel 25 al 29 de mayo, primera semana de finales.

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