

# Curso de Física Computacional

Semestre 2018-1

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

M. en C. Abraham Lima Buendía

Facultad de Ciencias - UNAM

18 de agosto de 2017



1. Presentación del curso

2. Sobre el curso

3. Temario

4. Evaluación del curso

5. Notas importantes

# 1. Presentación del curso

## 1.1 Objetivos

## 2. Sobre el curso

## 3. Temario

## 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.

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.

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

## 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.

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 por parte de los profesores y discusión del material de trabajo con 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.

# 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.

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](#).

De esta manera tendrán una referencia inicial y ya por su cuenta, consultar otros materiales y con ello, lograr un entendimiento completo del problema y su solución.



# ¿Programación?

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

El algoritmo que se proponga como solución deberá de “probarse” por lo que debemos de revisar la solución, así como la congruencia de la misma con la física y sobre todo, el margen de error que devuelve la solución numérica.

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.

# Tema 0 del curso

En el curso utilizaremos `python` para programar, se dará un breviario de programación básica como Tema 0, que no será evaluado ni formará parte de la calificación final.

Tendremos 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.

# 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

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

Usaremos dentro del curso la suite [Anaconda](#), que es de libre distribución 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 Fedora como distribución.

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, **les va a demandar seis horas 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

3.1 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

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 %

Este porcentaje considera necesariamente la asistencia del alumno en clase, ya que habrá ejercicios que requieran completarse y se deberá de entregar la solución en la siguiente sesión.

En el caso de que no asistan a la clase 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 50 %

Serán 3 tareas en total durante el semestre, se les proporcionarán los ejercicios de manera adelantada y con fecha de entrega definida, no se recibirán tareas extemporáneas, ni se enviarán por correo.

Se calificarán sólo aquellas tareas que entreguen el 50 % de los ejercicios.

# 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 %

Se realizarán tres exámenes durante el semestre, siendo del tipo teóricos-prácticos.

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

# Una sola reposición de 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:

- Sólo un examen parcial tenga una calificación no aprobatoria, es decir, que la calificación del examen parcial sea menor a 6 (seis)

# Una sola reposición de 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:

- Sólo un examen parcial tenga una calificación no aprobatoria, es decir, que la calificación del examen parcial sea menor a 6 (seis)
- Se debieron de haber presentado los otros dos exámenes parciales.

# Una sola reposición de 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:

- Sólo un examen parcial tenga una calificación no aprobatoria, es decir, que la calificación del examen parcial sea menor a 6 (seis)
- Se debieron de haber presentado los otros dos exámenes parciales.
- Se debieron de haber entregado las tres tareas completas.

En caso de contar con un promedio final aprobatorio del curso (los tres exámenes parciales aprobados), no se aplicará 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 los exámenes parciales.

# Examen final

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

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

# Examen final

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

- Se presentaron los tres los exámenes parciales.
- Entregaron las tres tareas del curso.
- Hay dos exámenes parciales con calificación menor a seis.



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

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

# Muy importante

Habr  dos rondas de examen final, si en la primera de ellas no se acredita el examen, ser  posible presentarlo en una segunda y  ltima ronda, se aclara que para tener derecho al segundo examen, se debe de presentar el primero.

*En caso de haber presentado al menos un examen parcial y/o haber entregado al menos una tarea se promediarán respectivamente las tareas y exámenes.*

Sólo se asentará en el acta de calificaciones **NP** si el(la) alumn@ 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.

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

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

# Consideraciones importantes 1

- El cupo para el curso es de 25 alumnos.

# Consideraciones importantes 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.

# Consideraciones importantes 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.



## Consideraciones importantes 2

- 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

- 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.
- 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

- Lunes 7 de agosto. Inicio del semestre 2018-1.

# Fechas importantes

- Lunes 7 de agosto. Inicio del semestre 2018-1.
- Jueves 1 de noviembre, día feriado

# Fechas importantes

- Lunes 7 de agosto. Inicio del semestre 2018-1.
- Jueves 1 de noviembre, día feriado
- Viernes 24 de Noviembre. Fin de Semestre.

# Fechas importantes

- Lunes 7 de agosto. Inicio del semestre 2018-1.
- Jueves 1 de noviembre, día feriado
- Viernes 24 de Noviembre. Fin de Semestre.
- Del 27 de noviembre al 1 de diciembre, primera semana de finales.

# Fechas importantes

- Lunes 7 de agosto. Inicio del semestre 2018-1.
- Jueves 1 de noviembre, día feriado
- Viernes 24 de Noviembre. Fin de Semestre.
- Del 27 de noviembre al 1 de diciembre, primera semana de finales.
- Del 4 al 8 de diciembre, segunda semana de finales.