

# Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén  
Fís. Abraham Lima Buendía

11 de enero de 2018

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

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

# Contenido

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

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

# Contenido

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

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

# Contenido

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



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

# Contenido

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

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

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

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

**Horario:** Martes y Jueves de 18 a 21 horas.



# Contenido

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

## **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 la exposición con diálogo 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.

## 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.

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.

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 manera que podrán tener una referencia inicial y ya por su cuenta, consultar otros materiales y con ello, lograr un entendimiento completo del problema y su solución.

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

# ¿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 como Tema 0, que no será evaluado ni formará parte de la calificación final.



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

Deberán de entregar su código fuente y el archivo ejecutable.

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 y la librería matplotlib integrada en Python, 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.

Para que puedan contar con el lenguaje de programación `Python` en sus equipos de casa o laptop, se proporcionará una guía para instalar *Anaconda*, que es una plataforma que integra el lenguaje, así como Spyder y otras herramientas y librerías que utilizaremos durante el semestre, en la guía podrán revisar el tipo de instalación dependiendo del sistema operativo que usen (Windows, Linux y Mac)

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

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

- 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.
- 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.

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

- 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.

# Contenido

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

# 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.
- Se les solicita que 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

- Para tener derecho a calificación, se requiere la asistencia mínima del 80 %.
- 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.

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

Se distribuye de la siguiente manera:

- **Ejercicios en clase 20 %:** para tener derecho a este porcentaje se requiere que el alumno esté presente en la clase, es decir, el ejercicio se entregará en la clase o se dejará para su solución y presentación en la siguiente sesión, 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 40 %** : Se entregará una tarea por tema, se les proporcionará de manera adelantada y con fecha de entrega definida, no se reciben tareas extemporáneas, ni por correo.
- **Exámenes 40 %** : Uno por tema, de tipo teóricos-prácticos.

No habrá reposiciones de exámenes parciales.

**Para tener derecho al examen final:** se deberán de cumplir todos los siguientes puntos:

- Cumplir con el 80 % de asistencia.
- Haber presentado todos los exámenes parciales.
- Haber entregado todas las tareas del curso.
- Que el promedio final sea menor a 6.0.
- No haber acreditado algún examen parcial, así tengan promedio mayor a 6.0.

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 o haber entregado al menos una tarea, y el promedio final sea menor a 6, la calificaci n final que se asent r  en el acta, ser  5. No hay renunci s a calificaciones.*

# Contenido

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

# Fechas importantes

- Lunes 4 de agosto. Inicio del semestre.
- Martes 16 de septiembre, día feriado.
- 22 de noviembre. Fin de Semestre.
- Viernes 21 de noviembre, fin de semestre.
- 24 al 28 de noviembre, primera semana de finales.
- 1 al 5 de diciembre, segunda semana de finales.
- 15 de diciembre, inicio de vacaciones de fin de año.