

Programa de Física Computacional

1. Descripción del Curso

Nombre: Física computacional **Código:** F811
Prerrequisitos: F704 – F705 **Créditos:** 5
Profesor: Giovanni Ramírez García **Semestre:** Segundo, 2017

Las computadoras se han convertido en una parte fundamental de la física moderna. Tradicionalmente, la física se dividía en dos grandes ramas: la física experimental y la física teórica. Sin embargo una nueva rama, la física computacional, ha ganado mucha importancia ya que combina métodos de ambas partes. Además, la simulación computacional de sistemas físicos ayuda a desarrollar y validar modelos, y permite investigar sus propiedades haciendo uso de métodos numéricos. Por otro lado, con el aumento del poder computacional, la disponibilidad de sistemas de procesamiento en paralelo y de sistemas de alto rendimiento, resulta de utilidad el conocer y manejar las distintas técnicas que ya se usan en la física computacional actualmente.

El curso inicia con una introducción para exponer algunos de los lenguajes de programación y la programación de alto rendimiento. Posteriormente se divide en cuatro partes: interpolación y aproximación numéricas, integración numérica y diferenciación numérica y métodos Monte Carlo. Las cuatro partes se utilizarán para desarrollar ejemplos del análisis de las propiedades de sistemas físicos mediante métodos numéricos y computacionales.

El lenguaje de programación que se utilizará es Fortran, un lenguaje de uso general pero especialmente dedicado a computación numérica y computación científica. Se usará la versión Fortran 95 porque ya incluye la especificación de *High Performance Fortran*. Se usará el compilador GNU puesto que es un *software* libre y de código abierto y se usará la versión que esté disponible en el clúster de la Escuela.

2. Competencias

2.1. Competencias generales

- 2.1.1 Plantear, analizar y resolver problemas físicos, tanto teóricos como experimentales, mediante la utilización de métodos analíticos, experimentales o numéricos.
- 2.1.2 Utilizar o elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico, simulación de procesos físicos o control de experimentos.
- 2.1.3 Demostrar una comprensión profunda de los conceptos y principios fundamentales, tanto de la física clásica como de la física moderna.
- 2.1.4 Estimar el orden de magnitud de cantidades mensurables para interpretar fenómenos diversos.
- 2.1.5 Demostrar hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el trabajo en equipo, el rigor científico, el auto- aprendizaje y la persistencia.
- 2.1.6 Buscar, interpretar y utilizar información científica.
- 2.1.7 Comunicar conceptos y resultados científicos en lenguaje oral y escrito ante sus pares, y en situaciones de enseñanza y de divulgación.

2.2. Competencias específicas

- a) Identificar y resolver problemas que pueden resolverse mediante análisis numérico y simulaciones con computadoras.
- b) Calcular la complejidad algorítmica de soluciones numéricas a problemas físicos.
- c) Conocer los lenguajes de programación científica, especialmente FORTRAN.
- d) Conocer y utilizar las soluciones de computación de alto rendimiento.

3. Unidades

3.1. Introducción

Descripción: Lenguajes de programación científica. Programación de Alto Rendimiento. Computabilidad y Complejidad. Clústers de computación

Duración: 16 períodos de 50 minutos

Metodología: Los períodos de clase son mayoritariamente magistrales, con tiempo dedicado a la solución de tareas cortas y tiempo para que el grupo de estudiantes pueda demostrar su aprendizaje y comprensión del tema mediante la exposición oral de los ejercicios y temas propuestos.

Evaluación: Se evaluará por medio de tareas cortas y una exposición.

3.2. Métodos numéricos de interpolación y aproximación

Descripción: Interpolación de Lagrange. Interpolación Spline. Interpolación por Aproximantes de Pade.

Duración: 14 períodos de 50 minutos

Metodología: Los períodos de clase son mayoritariamente magistrales, con tiempo dedicado a la solución de ejercicios guía y tiempo para que el grupo de estudiantes pueda demostrar su aprendizaje y comprensión del tema mediante la resolución y exposición oral de los ejercicios propuestos.

Evaluación: Se evaluará por medio de tareas cortas y un proyecto.

3.3. Métodos numéricos de integración

Descripción: Integración de ecuaciones diferenciales ordinarias. Órbitas y trayectorias. Resistencia del aire. Péndulo doble.

Duración: 14 períodos de 50 minutos

Metodología: Los períodos de clase son mayoritariamente magistrales, con tiempo dedicado a la solución de ejercicios guía y tiempo para que el grupo de estudiantes pueda demostrar su aprendizaje y comprensión del tema mediante la resolución y exposición oral de los ejercicios propuestos.

Evaluación: Se evaluará por medio de tareas cortas y un proyecto.

3.4. Métodos numéricos de diferenciación

Descripción: Ecuaciones diferenciales parciales. Ecuación de calor. Ecuación de onda. Ecuación de Poisson.

Duración: 14 períodos de 50 minutos

Metodología: Los períodos de clase son mayoritariamente magistrales, con tiempo dedicado a la solución de ejercicios guía y tiempo para que el grupo de estudiantes pueda demostrar su aprendizaje y comprensión del tema mediante la resolución y exposición oral de los ejercicios propuestos.

Evaluación: Se evaluará por medio de tareas cortas y un proyecto.

3.5. Métodos Monte Carlo

Descripción: Métodos de Monte Carlo. Simulación de decaimiento radiactivo y de propiedades de transporte. El problema de Percolación. Caminatas aleatorias.

Duración: 14 períodos de 50 minutos

Metodología: Los períodos de clase son mayoritariamente magistrales, con tiempo dedicado a la solución de ejercicios guía y tiempo para que el grupo de estudiantes pueda demostrar su aprendizaje y comprensión del tema mediante la resolución y exposición oral de los ejercicios propuestos.

Evaluación: Se evaluará por medio del proyecto final.

4. Evaluación del curso

Los porcentajes asignados a cada uno de los elementos de la evaluación están de acuerdo con el Reglamento General de Evaluación y Promoción del Estudiante de la Universidad de San Carlos de Guatemala. Es obligatorio cumplir con el 80 % de la asistencia al curso.

El curso se evaluará mediante la presentación proyectos enfocados a las unidades 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5. Durante el desarrollo de dichas unidades se definirán los detalles del proyecto y las fechas de entrega y exposición. Se aceptan proyectos después de la fecha y hora convenida aplicando el porcentaje dado por la función $100e^{-t/36}$ donde t es el tiempo de retraso en horas.

Tareas cortas y exposiciones	15	puntos
3 Proyectos	60	puntos
Proyecto final	25	puntos
Total	100	puntos

5. Bibliografía

Referencias comentadas

Para la introducción a los distintos lenguajes de programación se usarán los libros de Deitel y Deitel [1] para los lenguajes de C y C++, Langtangen [2] para Python, de Quarteroni, Saleri y Gervasio [3] para Octave. También se usarán las bibliotecas descritas en el libro *Numerical Recipes* de [4] et al. Para aprender Fortran se pueden usar los libros de Brooks [5], de Hahn [6] y de Koelbel [7]. Para los detalles del compilador GNU para Fortran se puede consultar el manual [8].

Para la parte del curso relacionada a computación de alto rendimiento y computación en paralelo se usarán los libros de Fountain [9], de Sipser [10], de Golub y Ortega [11] y de Dowd y Severance [12]. Además, vamos a tomar varios de los trabajos compilados en el libro de D'Hollander [13] para construirnos una idea de las aplicaciones y de los algoritmos usados en computación en paralelo.

El tercer capítulo del libro de Atkinson y Han [14] será usado para la parte de análisis y teoría de aproximaciones, el libro cuenta con definiciones muy formales pero en las clases magistrales se discutirá lo necesario para entender los métodos presentados. Sin embargo el libro de Cohen [15] puede usarse como una guía más didáctica.

Una introducción al Método de Monte Carlo aparece en el primer capítulo del libro de Landau y Binder [16] de donde también se tomará una guía para las aplicaciones en mecánica estadística. Por otro lado, el tercer capítulo del libro de Binder y Heermann [17] será usado como guía práctica en la aplicación del Método Monte Carlo. En caso de ser necesario un refuerzo en las áreas de termodinámica y mecánica estadística puede usarse el segundo capítulo del libro de Landau y Binder [16].

Referencias

- [1] H. Deitel, P. Deitel, and G. García, *Cómo programar en C/C+*. Pearson Educación, 1995.

- [2] H. Langtangen, *A Primer on Scientific Programming with Python*. Texts in Computational Science and Engineering, Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [3] A. Quarteroni, F. Saleri, and P. Gervasio, *Scientific Computing with MATLAB and Octave*. Texts in Computational Science and Engineering, Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [4] W. Press, *Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing*. No. v. 2 in Fortran numerical recipes, Cambridge University Press, 1996.
- [5] D. Brooks, *Problem Solving with Fortran 90: For Scientists and Engineers*. Undergraduate Texts in Computer Science, Springer New York, 2012.
- [6] B. Hahn, *FORTRAN 90 for Scientists and Engineers*. Elsevier Science, 1994.
- [7] C. Koelbel, *The High Performance Fortran Handbook*. Scientific and engineering computation, MIT Press, 1994.
- [8] The GNU Project (Free Software Foundation), *GNU Fortran*, 2017.
- [9] T. Fountain, *Parallel Computing: Principles and Practice*. Cambridge University Press, 2006.
- [10] M. Sipser, *Introduction to the Theory of Computation*. Computer Science Series, PWS Publishing Company, 1997.
- [11] G. Golub and J. Ortega, *Scientific Computing: An Introduction with Parallel Computing*. Elsevier Science, 2014.
- [12] K. Dowd and C. Severance, *High Performance Computing*. A Nutshell handbook, O'Reilly, 1998.
- [13] E. D'Hollander, G. Joubert, F. Peters, and H. Sips, *Parallel Computing: Fundamentals and Applications*. 2000.
- [14] K. Atkinson and W. Han, *Theoretical Numerical Analysis: A Functional Analysis Framework*. Texts in Applied Mathematics, Springer New York, 2001.
- [15] H. Cohen, *Numerical Approximation Methods: $\Pi \approx 355/113$* . Springer, 2011.
- [16] D. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [17] K. Binder and D. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*. Graduate Texts in Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2010.

<http://www.ecfm.usac.edu.gt/programas>