



Grado en Física 26918 - Física computacional

Guía docente para el curso 2011 - 2012

Curso: 2, Semestre: 2, Créditos: 6.0

Información básica

Profesores

- **Alfonso Tarancón Lafita** tarancon@unizar.es
- **Yamir Moreno Vega** yamir@unizar.es
- **Raquel Álvarez Baños** raqalv@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda haber cursado las asignaturas de Informática, Álgebra y Fundamentos de Física (Primer curso)

Para la realización de las clases prácticas es necesario conocer a nivel de usuario el sistema operativo Windows y/o Linux, un compilador de C, tipo gcc o Visual C y algún editor de texto, bien integrado con el compilador o independiente (como emacs).

Actividades y fechas clave de la asignatura

Las clases de teoría y de problemas se imparten a lo largo del segundo “semestre” (13 de febrero – 15 de junio) del segundo curso del Grado de Física.

Las clases prácticas se repartirán homogéneamente durante dicho periodo.

Sesiones de evaluación: Las sesiones de evaluación mediante una prueba escrita global son las que el Decanato de la Facultad de Ciencias determina y publica cada año en su página [web](#).

La evaluación de las prácticas, pasará en primer lugar por la evaluación continua de la actividad del alumno. Además se realizará una prueba final, donde el alumno deberá desarrollar diferentes actividades propuestas previamente, y que deberá entregar y demostrar su conocimiento el día de la prueba, mediante diferentes modificaciones a realizar durante la prueba.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

- 1: Resolver numéricamente la dinámica de una y muchas partículas bajo diferentes interacciones: gravitatoria, electromagnética o de otros tipos.
- 2: Resolver problemas físicos que requieran el uso de matrices
- 3: Analizar señales mediante métodos espectrales. Realizar transformadas de Fourier en una y más dimensiones
- 4: Generación de números aleatorios en el ordenador, con distribución plana; usar dicha distribución para generar distribuciones arbitrarias. Generación de puntos de forma homogénea sobre superficies
- 5: Realizar simulaciones estocásticas en problemas físicos sencillos
- 6: Analizar estadísticamente los resultados de una simulación. Cálculo de errores estadísticos
- 7: Simulaciones de Monte Carlo de modelos sencillos
- 8: Resolver numéricamente problemas físicos con las condiciones de contorno adecuadas

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Esta asignatura de Física Computacional se imparte en el segundo Curso, segundo cuatrimestre. En el Plan de Estudios se recomienda tener aprobada la asignatura "Informática", que se imparte en el primer curso, primer cuatrimestre. Supondremos pues que el alumno posee los conocimientos correspondientes a esta asignatura.

En la asignatura se compaginarán dos niveles de aprendizaje: por un lado el de las herramientas informáticas adicionales a las ya conocidas por el alumno, y por otro los algoritmos para resolver los problemas físicos.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

El objetivo de la asignatura es que los alumnos adquieran competencias avanzadas en el uso científico del ordenador.

La asignatura se imparte en el segundo cuatrimestre, durante 14 semanas efectivas. Se imparten 4 horas semanales (6 créditos), de las cuales 2 horas corresponden a clases teóricas y 2 a clases con ordenador.

En las clases teóricas se explicará el fundamento físico o matemático del problema, los algoritmos a utilizar y los aspectos del Código del lenguaje C aún no conocidos y necesarios para el caso. Se comentará brevemente la organización del código en funciones, macros, etc. y los aspectos especialmente complicados del mismo.

Los alumnos deberán realizar el trabajo de escritura del código de forma individual y previamente a la clase práctica. En la misma, se tratará de resolver los problemas comunes, dar indicaciones a aquellos que vayan más retrasados, y proponer ampliaciones y mejoras.

Las prácticas se realizan en un aula con 20 ordenadores. El compilador para realizar los programas será gcc (de GNU), que es libre y se ejecuta en todas las plataformas (Windows, Linux y MacOS). El sistema operativo dependerá de la disponibilidad en la sala de usuarios. Probablemente será Windows, si bien aquellos alumnos que deseen hacerlo en Linux y tengan

conocimientos para ello, podrán hacerlo así.

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Esta asignatura se enmarca en el módulo de Métodos Matemáticos del grado en Física y constituye junto con Ecuaciones Diferenciales, Cálculo Integral y Geometría, y Métodos Matemáticos el subgrupo de asignaturas, del segundo curso del Grado en Física, con contenidos relacionados específicamente con las Matemáticas.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

- 1: Destreza en el manejo de técnicas informáticas y programación
- 2: Dominio de los métodos matemáticos y numéricos básicos aplicables a la Física
- 3: Conocer alguno de los métodos de análisis numérico más empleados en el ámbito de la Física
- 4: Identificar las herramientas numéricas necesarias para resolver problemas físicos
- 5: Implementar métodos numéricos en un lenguaje de programación
- 6: Adquirir capacidad de análisis y evaluación de los resultados de un método numérico

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Competencias específicas adicionales

- 1: **Capacidad Crítica:** La construcción de programas informáticos que simulan sistemas físicos permite extraer resultados que pueden ser comparados con soluciones analíticas, o que pueden ser testados de diferentes maneras (por ejemplo comprobando magnitudes conservadas). La confrontación entre lo obtenido en el ordenador y los resultados reales deber ser percibido por los alumnos como un criterio básico de fiabilidad de sus resultados. Típicamente cuando el alumno piensa que el problema está resuelto correctamente, estas comprobaciones muestran diferentes errores. El alumno debe acostumbrarse a que también las simulaciones en ordenador, al igual que las teorías físicas, deben pasar el tamiz de la comprobación para establecer su validez
- 2: **Capacidad de Resolver Problemas:** En la asignatura no se trata sólo de dar conocimientos de informática, programación, cálculo numérico, etc. sino principalmente de que, dados estos conocimientos básicos, el alumno sea capaz de enfrentarse a problemas nuevos, plantearlos correctamente y elegir la metodología óptima para resolverlos, con más o menos aproximaciones y simplificaciones, pero dando siempre una respuesta. Esto es especialmente relevante para el contacto con problemas computacionales que se presentarán en la Empresas.
- 3: **Capacidad de Trabajo en Equipo:** El desarrollo moderno de programas implica la necesidad de que cada programador desarrolle una parte de un código que luego debe ser ensamblado con otros. Esto implica la necesidad de una disciplina en el trabajo personal, pensando en el trabajo del resto, y la puesta en común final de todas las partes para que el programa funcione correctamente. En este proceso el trabajo en equipo puede ser evaluado y visualizado por los alumnos, mostrando explícitamente si se ha desarrollado de forma correcta.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación

- 1:** Evaluación continua del aprendizaje del alumno mediante la resolución de problemas, cuestiones y otras actividades propuestas por el profesor de la asignatura. Participación en las clases prácticas y resolución correcta de los problemas propuestos. Puntuación Máxima: 1 punto
- 2:** Prueba escrita: Examen de conocimientos adquiridos durante el curso. Puntuación Máxima: 6 puntos
- 3:** Prueba Práctica: Tras una propuesta previa, el alumno deberá escribir un código para resolver el problema. Este código será presentado el día de la prueba práctica, donde el alumno deberá presentarlo adecuadamente, y además resolver las modificaciones propuestas por el profesor. Puntuación Máxima: 3 puntos

Superación de la asignatura mediante una prueba global única

Será idéntica a la del apartado anterior, sustituyendo el punto 1 por la presentación de un resumen de un tema impartido durante el curso, sobre el cual el profesor podrá realizar preguntas.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Las metodologías de enseñanza-aprendizaje que se plantean para conseguir los objetivos planteados y adquirir las competencias son las siguientes:

- Clases de teoría: Una hora semanal, donde se darán las nociones básicas de Física, matemáticas y programación necesarias.
 - Clases de problemas: Se discutirá la implementación en código de los temas propuestos en clase de teoría. Una hora semanal.
 - Sesiones en aulas informáticas: Dos horas (en una única sesión), donde se deberá acabar de escribir el código marcado en las clases de teoría y prácticas, hasta su compilación y ejecución.
 - Tutorías: Se fijarán las horas necesarias, en función del resto de horarios.
-

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

- 1:** Introducción y métodos básicos
- 2:** Métodos para ecuaciones diferenciales ordinarias
- 3:** Métodos numéricos para Álgebra. Uso de librerías de cálculo (Lapack)
- 4:** Análisis espectral
- 5:** Métodos para ecuaciones en derivadas parciales
- 6:** Introducción a los métodos de simulación: Monte Carlo y Dinámica Molecular
- 7:** Métodos de análisis estadístico de datos

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

La distribución, en función de los créditos, de las distintas actividades programadas es la siguiente:

1. Clases teórico-prácticas: Una hora semanal de teoría y otra de prácticas.
2. Clases en aulas informáticas: Dos horas semanales en una única sesión
3. Exámenes: Examen escrito de conocimientos; examen práctico, preparación de programa previamente propuesto (una semana antes del examen). Presentación del trabajo y realización de modificaciones sobre el mismo, en sesión en aula de informática, de una hora.

BIBLIOGRAFÍA

- El Lenguaje de Programación C, Brian W. Kernighan, Dennis M. Ritchie Pearson Education, Segunda Edición ISBN: 9688802050
- A book on C Al Kelley, Ira Pohl Addison Wesley, cuarta edición ISBN: 0201183994
- Methods of Theoretical Physics, Volúmenes I y II P.M. Morse, H. Feshbach, Addison Wesley ISBN Vol I: 0976202107, ISBN Vol II: 0976202115
- Numerical recipes in C, second edition, W.H.Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, Free download : <http://www.nrbook.com/a/bookcpdf.php>. Versión de papel: Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing, Third Edition W.H.Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery Cambridge University Press ISBN: 9780521880688
- Programazioni Scientifica: Linguaggio C, algoritmi e modelli nella Scienza
- L.M. Barone, E. Marinari, G. Organtini, F. Ricci-Tersenghi, Pearson Education ISBN: 9788871922423
- The art of computing programming D.E. Knuth Volume 1: Fundamental Algorithms. Third Edition (Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1997) ISBN 0-201-89683-4 Volume 2: Seminumerical Algorithms. Third Edition (Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1997) ISBN 0-201-89684-2 Volume 3: Sorting and Searching. Second Edition (Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1998) ISBN 0-201-89685-0

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada