

FÍSICA COMPUTACIONAL

CLAVE: 0715
SÉPTIMO SEMESTRE
CREDITOS: 12

MODALIDAD: Curso
CARÁCTER: Obligatorio
REQUISITOS: Computación, Cálculo Diferencial e Integral I-IV, Ecuaciones Diferenciales I, Introducción a la Física Cuántica, Matemáticas Avanzadas de la Física, Mecánica Analítica, Termodinámica, Electromagnetismo I

HORAS POR CLASE
HORAS POR SEMANA
HORAS POR SEMESTRE

TEÓRICAS: 2
TEÓRICAS: 6
TEÓRICAS: 96

Objetivos

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.

Metodología de la enseñanza

La exposición de los temas se hará por el profesor frente al pizarrón, pero empleando también las salas de cómputo de la Facultad y, cuando sea posible, las de las instituciones de investigación aledañas. Los temas del programa y los problemas sugeridos en el anexo aseguran que las ideas básicas del análisis numérico se cubran en contextos de física bien entendidos a este nivel de la carrera.

Evaluación

Mediante exámenes y/o trabajos monográficos o de investigación

Temario

- | | |
|--|--------|
| 1. ESCALAS, CONDICIÓN Y ESTABILIDAD | 12 hrs |
| 1.1 Introducción. | |
| 1.2 Sistemas numéricos de punto flotante y lenguajes. | |
| 1.3 Dimensiones y escalas. | |
| 1.4 Errores numéricos y su amplificación. | |
| 1.5 Condición de un problema y estabilidad de un método. | |
| 2. OPERACIONES MATEMÁTICAS BÁSICAS | 12 hrs |
| 2.1 Interpolación y extrapolación. | |
| 2.2 Diferenciación numérica. | |
| 2.3 Integración numérica. | |
| 2.4 Evaluación numérica de soluciones. | |
| 3. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS | 18 hrs |
| 3.1 Métodos simples. | |

3.2 Métodos implícitos y de multipasos.	
3.3 Métodos de Runge-Kutta.	
3.4 Estabilidad de las soluciones.	
3.5 Orden y caos en el movimiento de dos dimensiones.	
4. ANÁLISIS NUMÉRICO DE PROBLEMAS MATRICIALES	12 hrs
4.1 Inversión de matrices y número de condición.	
4.2 Valores propios de matrices tridiagonales.	
4.3 Discretización de la ecuación de Laplace y métodos iterativos de solución.	
5. Solución numérica de ecuaciones diferenciales elípticas en una y dos dimensiones.	
5. PROBLEMAS CLÁSICOS Y CUÁNTICOS DE VALORES PROPIOS	hrs
5.1 Algoritmo de Numerov.	
5.2 Integración de problemas con valores en la frontera.	
5.3 Formulación matricial para problemas de valores propios.	
5.4 Formulaciones variacionales.	
6. SIMULACIÓN COMPUTACIONAL	18 hrs
6.1 Método de Monte Carlo.	
6.2 Dinámica molecular.	
6.3 Otros algoritmos de simulación.	
6.4 Aplicación a problemas de física de interés actual.	
7. ECUACIONES DE EVOLUCIÓN	12 hrs
7.1 La ecuación de ondas y su discretización en diferencias finitas. Criterio de Courant.	
7.2 La ecuación de Fourier para el calor y su discretización en diferencias finitas. Estabilidad del esquema.	

ANEXO: EJEMPLOS DE PROBLEMAS

1. ESCALAS, CONDICIÓN Y ESTABILIDAD

Solución de ecuaciones en diferencias $x_{n+1} = \alpha x_n$, para $x > 1$, $\alpha < 1$, $\alpha = 1$ y análisis de la propagación o decaimiento del error. Análisis dimensional y tamaño de mallas. Ecuación logística discreta y continua como ilustración de consistencia.

2. OPERACIONES MATEMÁTICAS BÁSICAS

Integración para cálculo de campos magnéticos usando la ley de Biot-Savart. Campo de una espira. Solución exacta en el eje de simetría, cálculo asintótico para asimetrías pequeñas. Cálculo numérico para asimetrías grandes. Comparaciones en las regiones de traslape.

Cuantización semiclásica de vibraciones moleculares. El oscilador armónico. Potenciales de Lennard-Jones para moléculas diatómicas. Solución por el método de Newton y la secante, de ecuaciones algebraicas trascendentes que aparecen en el cálculo analítico de valores propios en ecuaciones diferenciales ordinarias.

3. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

Cálculo del periodo para el problema de dos cuerpos por integración numérica de las ecuaciones y su comparación con el cálculo numérico de la expresión analítica. Solución del problema de la relación entre el ángulo y el tiempo en el problema de Kepler. Cálculo aproximado de ceros. El problema de Kepler perturbado y su solución numérica. Comparación entre los resultados de pequeñas perturbaciones y los asintóticos. Problema de Henon y Heiles. Problemas de Silnikov y dependencia sensitiva de las condiciones iniciales.

4. ANÁLISIS NUMÉRICO DE PROBLEMAS MATRICIALES

El problema del potencial electrostático y su discretización. Solución por métodos directos e iterativos. Comparación con soluciones exactas. Determinación de la densidad de carga nuclear. (Modelo de la gota.) Discretización del problema de la cuerda vibrante y la matriz de Rayleigh. Solución exacta para valores y vectores propios de esta matriz. Comparación con los resultados numéricos.

Problemas sin solución exacta y comparación de resultados numéricos con cálculos analíticos de perturbación.

5. PROBLEMAS CLÁSICOS Y CUANTÍCOS DE VALORES PROPIOS

Valores propios para problemas estacionarios tipo Schrödinger.

Frecuencias naturales de vibración para sistemas oscilantes de una y dos dimensiones.

Problemas de cálculo de raíces de varias variables que aparecen en formulaciones variacionales con pocos parámetros libres.

6. SIMULACIÓN COMPUTACIONAL

Generación de números al azar.

Integración multidimensional.

Movimiento de una partícula en un fluido bajo la acción de la gravedad.

Estudio de un sistema de varias partículas que interactúan a través de un potencial.

Transiciones de fase en modelos tipo Ising.

7. ECUACIONES DE EVOLUCIÓN

Propagación de ondas según la ecuación $u_t + cu_x = 0$.

Problemas con valores iniciales y de señalización. Comparación con soluciones exactas. El caso $c = c(x)$.

Estabilidad de esquemas en diferencias finitas usando series discretas de Fourier. Flujo de calor y solución de $u = Du_{xx}$ en un intervalo.

Bibliografía básica

Kahaner, D., Moler, C., Nash, S., 1989, **Numerical methods and software**, Prentice-Hall, USA.

Koonin, S. E., Meredith, D. C., 1990, **Computational physics (Fortran version)**, Addison Wesley Publishing Company, USA.

Bibliografía complementaria

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.