



Universidad de Sonora
División de Ciencia Exactas y Naturales
Departamento de Física
Licenciatura en Física

Tópicos de Física Computacional

Eje formativo:	Especializante		
Requisitos:	Física computacional I		
	Métodos Matemáticos de la Física II		
Carácter:	Optativo		
Horas:	Teoría	Taller	Laboratorio
	2	4	0
Créditos:	08		
Servicio del:	Departamento de		
	Física		

1. Introducción

En el estudio de los diferentes campos de la Física, al establecer modelos matemáticos para el estudio de los fenómenos, es común que no se pueda dar una solución exacta al problema matemático inherente al modelo, por lo que se hace necesario recurrir a soluciones obtenidas mediante el empleo de computadoras. La Física Computacional es un enfoque multidisciplinario que combina a la Física, a las Ciencias de la Computación y a las Matemáticas Aplicadas, para resolver problemas aplicados de interés que suceden en el mundo real. El estudio de estos métodos y herramientas constituye el núcleo central de la asignatura *Tópicos de Física computacional*, pero buscando su aplicación en algún problema en particular.

2. Objetivo general

Esta asignatura tiene como objetivo general el analizar y aplicar métodos computacionales, tanto numéricos como simbólicos, en términos de su formación, su convergencia y su error, así como de su implementación computacional y viabilidad para resolver problemas científicos de carácter específico.

3. Objetivos específicos

Al finalizar el curso, el estudiante debe ser capaz de

- Conocer y aplicar la FFT en el análisis espectral.
- Resolver numéricamente ecuaciones diferenciales parciales.
- Realizar simulación computacional acorde al nivel de un curso de licenciatura.
- Identificar los elementos básicos del cálculo en paralelo.

4. Temario

El temario de esta asignatura comprende los siguientes tópicos:

- 1) Introducción. Análisis de Fourier. Transformada rápida de Fourier.
- 2) Solución de ecuaciones diferenciales parciales. Separación de variables. Problemas de valores iniciales
- 3) Simulación computacional.
 - Introducción
 - Simulación de dinámica molecular.
 - Método de MonteCarlo.
- 4) Introducción al cálculo en paralelo.

5. Estrategias didácticas

Como parte de las estrategias didácticas de esta asignatura se sugiere:

- procurar que el curso se desarrolle centrando el proceso de aprendizaje en el alumno, promoviendo la participación activa de los estudiantes con especial atención al desarrollo de habilidades de carácter general así como específicas de los métodos computacionales involucrados.
- desarrollar el curso en forma de taller bajo la modalidad de problemas dirigidos donde se involucren las herramientas requeridas (aprendizaje basado en proyectos).
- tener acceso a un laboratorio de estaciones de trabajo Linux, donde se encuentren sistemas de cómputo simbólico, numérico y de visualización instalados, para que el estudiante pueda trabajar en forma individual, buscando desarrollar el curso utilizando recursos de software libre y de fuente abierta.

- contar con una página en Internet donde se encuentren los materiales para apoyar las actividades del curso, donde cada estudiante pueda acceder a los materiales y actividades en línea para el trabajo en forma individual.
- tener acceso a sistemas de cómputo de alto rendimiento con sus herramientas (Fortran90, C, MPI, etc).
- promover la investigación bibliográfica sobre los aspectos teóricos del curso.

6. Estrategias para la evaluación

La evaluación del curso será con base en los productos desarrollados a lo largo del curso, donde el estudiante ira mostrando su avance en la incorporación de las herramientas de cómputo simbólico, numérico y de visualización como un método auxiliar en simulación y resoluciones de problemas..

7. Bibliografía

La bibliografía, recursos en Internet y herramientas sugeridas para este curso son los siguientes:

1. Advanced Mathematical Methods with Maple, Derek Richards, Cambridge University Press, November 2001, ISBN 0521779812
2. Advanced Mathematics and Mechanics Applications Using Matlab, Howard B Wilson, Louis H Turcotte, David Halpern, CRC Press, September 2002, ISBN 158488262X
3. Mathematical Computing, David Betounes, Mylan Redfern, Springer Verlag, January 2002, ISBN 0387953310
4. Experimentation in Mathematics, Jonathan M Borwein, A K Peters, Ltd, April 2004, ISBN 1568811365
5. Computer Algebra and Symbolic Computation, Joel S. Cohen, A K Peters, Ltd, January 2003, ISBN 1568811594
6. A First Course in Scientific Computing: Symbolic, Graphic, and Numerical Modeling Using Maple, Java, Mathematica, and Fortran90., Rubin H. Landau, Princeton University Press, 2005, ISBN 0.691-12183-4
7. An Introduction to Computational Physics, Tao Pang, Cambridge University Press, September 1997, ISBN 0521485924
8. Computational physics. Fortran Version. Steven E. Koonin, Dawn C. Meredith. Westview press, 1990, ISBN: 0-201-38623-2
9. Computational Physics: An introduction, Franz Vesely, Franz J. Vesely. Second edition. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 1994, ISBN: 0-306-46631-7
10. Computational Methods in Physics and Engineering, Samuel S M Wong, World Scientific, April 2003, ISBN 9810230435
11. Computational Physics, J M Thijssen, Cambridge University Press, June 1999, ISBN 0521575885
12. Numerical Recipes in Fortran 77, The Art of Scientific Computing, Vol. 1 of Fortran Numerical Recipes, Cambridge University Press, Second Edition, 2001 (<http://library.lanl.gov/numerical/bookfpdf.html>)

13. Numerical Recipes in Fortran90, Vol. 2 of Fortran Numerical Recipes, Cambridge University Press, Second Edition, 2002 (<http://library.lanl.gov/numerical/bookf90pdf.html>)
14. Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, Second Edition, 2002. (<http://library.lanl.gov/numerical/bookcpdf.html>)
15. The Math Forum on Numerical Analysis (<http://mathforum.org/advanced/numerical.html>)
16. Michael Wester, A Critique of the Mathematical Abilities of CA Systems (http://www.math.unm.edu/~wester/cas_review.html)
17. Sistema Axiom (<http://savannah.nongnu.org/projects/axiom>). Axiom BSD, es un sistema de álgebra computacional diseñado para cómputo científico.
18. Sistema Maxima (<http://maxima.sourceforge.net/>). Maxima, es un sistema de álgebra computacional desarrollado en Lisp para realizar cómputo simbólico. El sistema está basado en MACSYMA y es licencia GPL.
19. Sistema Yacas (<http://yacassourceforge.net/>). El sistema YACAS GPL, es un sistema de álgebra computacional de propósito general. Está diseñado para tanto para cómputo simbólico, como numérico.
20. Sistema Octave (<http://www.octave.org/>). El sistema GNU Octave, es un lenguaje de alto nivel diseñado principalmente para cómputo numérico. El lenguaje Octave es compatible con Matlab.
21. Sistema Rlabplus (<http://rlabplus.sourceforge.net/>). Rlabplus es un ambiente de programación científica interpretado. Proporciona un lenguaje de alto nivel diseñado para el desarrollo rápido de programas y prototipos, así como para el procesamiento y visualización de datos.
22. Gnuplot (<http://www.gnuplot.info/>). Herramienta potente para graficación de datos y funciones.
23. PtPlot (<http://ptolemy.eecs.berkeley.edu/java/ptplot/>). Herramienta para graficación de datos y funciones desarrollada en Java.
24. Grace (<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>). Herramienta de graficación WYSIWYG desarrollada para el sistema de ventana X.
25. SourceForge.Net (<http://sourceforge.net>). Repositorio de Software de Libre y de Fuente Abierta..
26. Netlib.Org (<http://www.netlib.org/>). Repositorio de software matemático.
27. Jscience (<http://jscience.org/>). Repositorio de herramientas Java para aplicaciones científicas.

La bibliografía complementaria sugerida es la siguiente:

- 1) Richard L. Burden, J. Douglas Faires. *Análisis Numérico*, Séptima Edición, Thomson Learning, (2002). ISBN: 0-534-38216-9.
- 2) David Kincaid, Ward Cheney. *Numerical analysis. Mathematics of scientific computing*. Third edition. Thomson Brooks/Cole (2002). ISBN: 0-534-38905-8.
- 3) Melvin J. Maron, Robert J. Lopez. *Análisis Numérico. Un enfoque práctico*, Tercera edición. CECSA (1995). ISBN: 9-682-61251-9.
- 4) Brice Carnahan, H.A. Luther, James O. Wilkes. *Applied numerical methods*. John Wiley and Son (1969). ISBN: 0-471-13507-0.

- 5) David Kahaner, Cleve Moler, Stephen Nash. *Numerical Methods and Software*. Prentice Hall (1988). ISBN: 0-136-27258-4.
- 6) William H Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77. The Art of Scientific Computing*, Second edition. Cambridge University Press (1992). ISBN: 0-521-43064-X.
- 7) William H Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 90. The Art of Scientific Computing*, Second edition. Cambridge University Press (1996). ISBN: 0-521-57439-0.

8. Perfil docente

El profesor que imparte esta materia deberá poseer una formación sólida en el campo de la física, así como experiencia en el uso del cómputo simbólico, numérico y sistemas de visualización científica. Deberá además tener la capacidad de dirigir al estudiante para que este adquiera habilidades en Física Computacional. Se requiere que el profesor o facilitador del curso, tenga fluidez de trabajo en ambientes de cómputo científico en plataformas Linux/UNIX, ambientes gráficos y en aplicaciones via Internet; además de poseer un dominio completo del temario del curso, que le permita trascender su contenido con base en sus opiniones y comentarios.