



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

SALTA, 28 de diciembre de 2021

EXP-EXA N° 8515/2018

RESCD-EXA N° 389/2021

VISTO la presentación efectuada por el Dr. Luis CARDÓN, mediante la cual propone el dictado del curso “*Física Computacional*”, como materia optativa para la carrera de Maestría en Matemática Aplicada – Plan 2006, para el período lectivo 2021, y

CONSIDERANDO:

Que la Comisión de Docencia e Investigación, teniendo en cuenta el despacho del Comité Académico de la Maestría en Matemática Aplicada de fs. 63, aconseja autorizar el dictado del curso “*Física Computacional*”, como materia optativa para la carrera de Maestría en Matemática Aplicada – Plan 2006, a cargo del Dr. Luis CARDÓN.

Por ello, y en uso de las atribuciones que le son propias.

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(en su sesión ordinaria, a distancia, del 15/12/2021)

RESUELVE

ARTÍCULO 1º: Tener por autorizado el dictado virtual del curso “*Física Computacional*”, como Materia Optativa para la carrera de Maestría en Matemática Aplicada – Plan 2006, bajo la responsabilidad del Dr. Luis CARDÓN.

ARTICULO 2º: Aprobar el programa analítico y el sistema de evaluación del curso, de acuerdo al detalle que se explicita en el Anexo de la presente resolución.

ARTÍCULO 3º: Hágase saber al Dr. Luis CARDÓN, al Departamento de Física, al Comité Académico de Maestría en Matemática Aplicada y a la Dirección Administrativa de Posgrado. Cumplido, resérvese.

mxs


Dra. MARÍA RITA MARTEARENA
SECRETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Ing. DANIEL HOYOS
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

ANEXO de la RESCD-EXA N° 389/2021 – EXP-EXA N° 8515/2018

Materia Optativa: “Física Computacional”

Carrera: Maestría en Matemática Aplicada – Plan 2006

Profesor responsable y Docente: Dr. Luis CARDÓ (UNSa.)

Fines y Objetivos

La **Física Computacional** es una disciplina que se ha establecido como el tercer pilar, junto con la teoría y la experimentación, de la Física moderna. Se ocupa de la modelización, simulación y análisis de fenómenos de distinta naturaleza a través de la computación intensiva. Con diversos nombres en el pasado, simulación numérica, computación científica, computación avanzada, computación de alta performance, métodos numéricos, métodos numéricos aplicados, con nuevas modalidades en el presente (high-end capability computing, high end capacity computing) sin consenso sobre su definición, la Física Computacional y sus técnicas se han aplicado desde temprano en la historia de la computación.

Además de los aspectos propios relacionados con los modelos y teorías de la Física, existen otros aspectos computacionales sin los cuales aquella no podrían avanzar. Estos son los referidos al desarrollo de software avanzado para la computación de alta performance, a la implementación de clusters de computadoras para el cálculo en paralelo, a los métodos de preprocesamiento, generación de mallas, generación de sólidos, métodos de posprocesamiento y visualización, técnicas avanzadas de almacenamiento de datos, algoritmos para la solución de sistemas algebraicos, etc. sin los cuales la Física Computacional no sería posible. En otra dirección, el control de grandes experimentos en física ha dado origen a otros aspectos de las ciencias computacionales.

El objetivo de la asignatura es introducir al estudiante en la resolución de algunos problemas físicos prototípicos que den pie a la aplicación de técnicas numéricas, programación y paradigmas de computación avanzados.

Metodología y descripción de las actividades Teórico-Prácticas.

El curso se centrará en la actividad de aprendizaje del alumno, que se organizará de la siguiente manera:

- Presentación del tema: el docente hará una breve exposición del tema, de los objetivos de aprendizaje buscados, de las herramientas a utilizar y de las tareas a encarar. Se presentará el material de estudio y trabajo (material de apoyo, bibliografía, transparencias, videos, software, etc.) que se dispondrá con antelación en la plataforma moodle. El estudiante tendrá la responsabilidad de trabajar con el material de estudio.
- Trabajo de laboratorio: en base al trabajo previo, se resolverán en clase las dudas y problemas que hayan surgido y se avanzará hacia la realización de la tarea (teórica o computacional) propuesta.

///...



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

...///-2-

ANEXO de la RESCD-EXA N° 389/2021 – EXP-EXA N° 8515/2018

- Entrega: el estudiante organizará y presentará los resultados de su trabajo en un informe en donde se describirá el problema, las herramientas numéricas y computacionales para su resolución y los resultados obtenidos. Acompañará al informe escrito una presentación oral con apoyo multimedial.

El trabajo de los alumnos y el docente se realizará durante las horas teórico-prácticas previstas.

Duración y distribución horaria: 60 horas, distribuidas en 15 semanas.

Distribución semanal: 4 hrs. teórico-prácticas distribuidas en dos secciones por semana.

Conocimientos previos necesarios: Es necesario poseer conocimientos de ecuaciones a derivadas parciales, algebra lineal, y conocimiento práctico de un lenguaje de programación (Fortran, Basic, Pascal, C). Será recomendable tener conocimientos de básicos de física, ya que los métodos numéricos a implementar estarán orientados a resolver problemas de esta ciencia en particular.

Sistema de evaluación: La asignatura se aprobará con los informes (escritos y/u orales) sobre tareas asignadas. Se calificará de 1 a 10, se aprobará con 7 puntos.

Lugar y fecha de dictado: Segundo semestre 2021. Curso virtual a través de la plataforma exavirtual.

Inscripciones: Mesa de Entradas Virtual de la Facultad de Ciencias Exactas.

Contenidos mínimos: Lenguajes y paradigmas de programación en Física. Visualización y análisis de datos. Algebra numérica. Librerías. Métodos de Monte Carlo. Métodos numéricos para ecuaciones diferenciales ordinarias en dinámica no lineal. Métodos numéricos para ecuaciones a derivadas parciales en ondas y electromagnetismo. Métodos numéricos en problemas hiperbólicos en mecánica de fluidos.

Programa del curso

Tema 1. Lenguajes y paradigmas de cálculo en Física.

Python. Conceptos avanzados de C. Conceptos básicos de C++ y de programación orientada a objetos. Fortran 9x. Librerías numéricas. Software de visualización de datos científicos: gnuplot, ParaView, matplotlib.

///...



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

...///-3-

ANEXO de la RESCD-EXA N° 389/2021 – EXP-EXA N° 8515/2018

Tema 2. Procesos aleatorios y simulación con Monte Carlo.

Los procesos aleatorios en ciencia. Generadores de números aleatorios. Secuencias aleatorias. Evaluación de la aleatoriedad y de la uniformidad. Números aleatorios para distribución no uniformes. El camino aleatorio, simulación, implementación. Decaimiento radiativo. Modelos discretos y continuos. Integración por Monte Carlo. Monte Carlo multidimensional.

Tema 3. Matrices. Sistemas de ecuaciones matriciales. Ajuste de datos.

Sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Problema de masas acopladas. Sistemas lineales de ecuaciones. Métodos directos: eliminación de Gauss, descomposición LU, gradientes conjugados. Cálculo de determinantes. Diagonalización. Autovalores. Cómputos matriciales: aspectos prácticos y de programación. Librerías científicas. Paralelización del cálculo matricial. Aplicaciones: Estática no lineal, masas acopladas.

Tema 4. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias en problemas no lineales discretos y continuos.

Métodos predictor-corrector: Adams-Bashforth-Moulton. Aplicaciones: oscilaciones no lineales, resonancia, batido, fricción. Partículas cuánticas. El problema cuántico de autovalores. Algoritmo de Numerov para la ecuación de Schroedinger. Dispersión, proyectiles, y órbitas. Balística y movimiento planetario. El problema restringido de los tres cuerpos. Problema de poblaciones. Modelo logístico. Mapas no lineales. Puntos fijos. Atractores. Implementación de mapas. Diagrama de bifurcación. Coeficientes de Lyapunov. Péndulos caóticos. Solución mediante integrales elípticas. Implementación y visualización. Caos en el espacio de fases. Bifurcaciones en el péndulo caótico. El péndulo doble. Modelos de acoplados de predador y presa. Modelo de Lotka-Volterra. Límites. Eficiencia.

Tema 5. Análisis de Fourier: señales y filtros.

Análisis de Fourier de oscilaciones no lineales. Series de Fourier. Transformada de Fourier. Transformada discreta de Fourier. Aliasing. Algoritmos. Ruido y filtros. Filtros por autocorrelación. Filtros mediante transformada. Filtros digitales. Implementación de FFT.

Tema 6. Ecuaciones diferenciales parciales: electrostática, ondas, cuerdas, paquetes cuánticos y electromagnetismo.

Potenciales electrostáticos. Solución en series de Fourier, expansión polinómica y diferencias finitas. Capacitores. La ecuación de difusión mediante Leapfrog. Cuerdas vibrantes. La ecuación hiperbólica de onda. Solución mediante diferencias finitas centradas. Condición de Courant. Fricción. Tensión y densidad variable. Efecto de la gravedad. Paquetes de onda cuánticos. La ecuación de Schroedinger no estacionaria. Paquetes de onda en pozos de potencial. Algoritmos 2D. Ondas electromagnéticas mediante diferencias finitas en dominio temporal. Las ecuaciones de Maxwell. El algoritmo FDTD.

///...



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina

...///-4-

ANEXO de la RESCD-EXA N° 389/2021 – EXP-EXA N° 8515/2018

Tema 7. Solitones y mecánica de fluidos computacional.

Ecuación no lineal de onda. Advección, shocks, solitones de Russell. La ecuación de continuidad y de advección. La ecuación de Burger y ondas de choque. Algoritmo de Lax-Wendroff. Dispersión. Solitones en aguas poco profundas. La ecuación de Korteweg y de Vries. Solución analítica. Algoritmo. Hidrodinámica de ríos. La ecuación de Navier Stokes. Condiciones de borde. Solución por diferencias finitas y sobrerelajación.

Programa de laboratorio: Se realizará un laboratorio-tarea por cada uno de los temas del programa.

Bibliografía.

- Computational Physics. Problem solving with Python . Rubin H. Landau, Manuel José Páez, Cristian C. Bordeianu. Wiley-VCH, 3rd. Edition, 2015.
- Computational Physics. Problem solving with computers. Rubin H. Landau, Manuel José Páez, Cristian C. Bordeianu. Wiley-VCH, 2nd. Edition, 2007.
- An Introduction to Computational Physics. Tao Pamg. Cambridge University Press, 2nd. Edition, 2006.
- A first course in Computational Physics. Paul L DeVries. John Wiley and Sons, 1994.
- Computational Physics. 2nd Edition. Nicholas J. Giordano, Hisao Nakanishi Pearson. 2005.
- Computational Physics: Fortran Version. Steven E. Koonin y Dawn Meredith. Westview Press. 1998.
- Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems. T.S. Parker and L.O. Chua. Springer Verlag. 1989.
- A first course in chaotic dynamical systems. Theory and experiments. Robert L. Devaney. Addison Wesley. 1992.
- Programación en C. Metodología, estructura de datos y objetos. Luis Joyanes Aguilar e Ignacio Zahonero Martínez. McGraw-Hill, 2001.
- Learning Python. Mark Lutz y David Ascher. O'Reilly. 2004.
- Learning Python. Help for Programmers. Mark Lutz. O'Reilly. 2009.
- FORTRAN 90 for Scientists and Engineers. Brian Hahn. Butterworth-Heinemann, 1994.
- CUDA Fortran for Scientists and Engineers: Best Practices for Efficient CUDA Fortran Programming. Gregory Ruetsch, Massimiliano Fatica. Elsevier. 2014.
- Fortran 90 5-day course notes. MC. Marshall. University of Liverpool, 1997.
- Introduction to Programming with Fortran: With Coverage of Fortran 90, 95, 2003, 2008 and 77 3rd ed. Ian Chivers, Jane Sleightholme, Springer, 2015.
- Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing. William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery
- Numerical Recipes in Fortran 90: Volume 2 of Fortran Numerical Recipes: The Art of Parallel Scientific Computing, 2nd Edition. William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, Cambridge University Press, 1996.

///...




Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina


...///-5-

ANEXO de la RESCD-EXA N° 389/2021 – EXP-EXA N° 8515/2018

- IPython Interactive Computing and Visualization Cookbook. Second Edition. Cyrille Rossant. Packt Publishing. 2018.
- Programación en C. Segunda Edición, B. Gottfried, Mac. Graw Hill, 1997.
- C con ejemplos. Perry Greg.
- Programación en Lenguaje C. Enrique Quero Catalinas.
- The GNU Scientific Library. Reference Manual. Galasy y otros. The GSL Team. 2006. http://en.wikipedia.org/wiki/C_programming_language
- Numerical Recipies in C. Press, Teukolsky, Vettering, Flannery, Cambridge University Press, 1992. <http://www.library.cornell.edu/nr/bookcpdf.html>
- Applied Numerical Analysis. C.F Gerald. AddisonWesly Co., 1973.
- Programming in Fortran 90. A first course for Engineers and Scientists. I.M. Smith. John Wiley and Sons. 1995.


Dra. MARÍA RITA MARTEARENA
SECRETARIA ACADÉMICA Y DE INVESTIGACIÓN
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Ing. DANIEL HOYOS
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa