

PROGRAMA DE CURSO

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA LA CIENCIA E INGENIERÍA

A. Antecedentes generales del curso:

Departamento	Física (DFI)					
Nombre del curso	Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería	Código	FI3104	Créditos	6	
Nombre del curso en inglés	<i>Numerical methods for science and engineering</i>					
Horas semanales	Docencia	3	Auxiliares	--	Trabajo personal	7
Carácter del curso	Obligatorio	X	Electivo			
Requisitos	FI2002: Electromagnetismo, MA2002: Cálculo Avanzado y Aplicaciones, CC1002: Introducción a la programación					

B. Propósito del curso:

Cuando la solución analítica a un problema científico no existe o es muy compleja, el uso de computadoras y métodos numéricos apropiados pueden permitir encontrar la solución al problema planteado. Asimismo, **en ciencias experimentales los datos obtenidos deben ser procesados y analizados, mediante el uso de distintos métodos numéricos, seleccionándolos de acuerdo a las ventajas y limitaciones de cada uno.**

En este contexto, el curso tiene como propósito que los y las estudiantes resuelvan problemas de cálculo numérico para ciencias e ingeniería, programando y diseñando códigos computacionales simples mediante el uso de librerías numéricas que selecciona según criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad o mediante la implementación de algoritmos.

El curso tributa a las siguientes competencias específicas (CE) y genéricas (CG):

CE2: Formular y resolver ecuaciones que permiten describir y predecir el comportamiento de sistemas físicos, utilizando herramientas matemáticas y/o numéricas.

CE7: Manejar programas que permiten resolver problemas de forma numérica, y visualizar resultados en el contexto experimental y teórico.

CE8: Desarrollar códigos computacionales utilizando lenguajes de programación, a fin de resolver problemas físicos.

CG3: Compromiso ético:

Actuar de manera responsable y honesta, dando cuenta en forma crítica de sus propias acciones y sus consecuencias, en el marco del respeto hacia la dignidad de las personas y el cuidado del medio social, cultural y natural.

C. Resultados de aprendizaje:

Competencias específicas	Resultados de aprendizaje
CE2	RA1: Aplica métodos de cálculo numérico para proponer soluciones a problemas cuantitativos complejos, seleccionándolos de acuerdo a las ventajas y limitaciones de cada uno de ellos.
CE7, CE8	RA2: Utiliza librerías numéricas que selecciona según criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad, escribiendo códigos computacionales simples para la resolución de problemas de cálculo numérico.
CE8	RA3: Programa y diseña códigos o algoritmos computacionales simples para los distintos métodos numéricos, considerando criterios de eficiencia, orden de cálculo y error.
Competencias genéricas	Resultado de aprendizaje
CG3	RA4: Trabaja en sus tareas y ejercicios, utilizando estándares científicos y éticos, tales como rigurosidad para la selección e implementación de los métodos, así como una entrega honesta y veraz del análisis y tratamiento de los datos y del uso de gráficos y figuras.

D. Unidades temáticas:

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
1	RA1, RA2, RA3	Métodos Numéricos Basados en la Descripción Discreta de las Funciones	2 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
1.1. Discretización. Error de truncación y redondeo. 1.2. Derivadas discretas (<i>forward</i> , <i>backward</i> , centradas). 1.3. Integración numérica. Trapecios, Simpson y Gauss. 1.4. Integrales singulares (dominios infinitos y/o con singularidades integrales en el dominio). 1.5. Interpolación. 1.5.1. Interpolación por polinomios. 1.5.2. Interpolación Spline y B-Spline. 1.6. Implementación de métodos numéricos de descripción discreta de funciones en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas. 1.7. Aplicaciones a problemas de ciencias e ingeniería en el contexto de la descripción discreta de las funciones.		El/la estudiante: 1. Identifica los factores que originan errores de truncación y redondeo, inherentes a la formulación del problema y al método empleado. 2. Regulariza integrales singulares, utilizando cambios de variables. 3. Evalúa integrales, usando las reglas de integración numérica. 4. Usa librerías numéricas, seleccionándolas de acuerdo a criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad. 5. Programa un código computacional simple, considerando criterios de eficiencia, orden de cálculo y error, para el cálculo de derivadas discretas, integrales y/o interpolación de una función o de una serie de datos. 6. Utiliza la descripción discreta de las funciones en la resolución de problemas de diversa naturaleza en ciencias e ingeniería 7. Analiza los datos obtenidos mediante métodos numéricos basados en la descripción discreta de funciones.	
Bibliografía de la unidad		[1] Caps. 1, 3, 4.	



Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
2	RA1, RA2, RA3	Solución de Ecuaciones no lineales: Raíces y Optimización	2 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>2.1. Métodos para el cálculo de raíces:</p> <p>2.1.1. Métodos de la bisección, secante y tangente.</p> <p>2.1.2. Método de Newton-Raphson.</p> <p>2.1.3. Caso multidimensional: Newton y Broyden.</p> <p>2.2. Métodos de optimización:</p> <p>2.2.1. Caso unidimensional.</p> <p>2.2.2. Método de gradiente conjugado.</p> <p>2.2.3. Ajuste de mínimos cuadrados.</p> <p>2.3. Implementación en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas.</p> <p>2.4. Aplicaciones a problemas de ciencias e ingeniería en el contexto de solución de ecuaciones no lineales.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Escribe códigos computacionales simples para la resolución de ecuaciones no lineales, considerando criterios de eficiencia, orden de cálculo y error. 2. Aplica métodos numéricos de optimización en problemas complejos no-lineales de funciones en espacios de variables continua. 3. Programa y diseña códigos computacionales simples para obtener raíces y optimización, usando métodos numéricos de la bisección, secante y tangente y Newton- Raphson. 4. Utiliza los métodos numéricos de la bisección, secante y tangente y Newton-Raphson para obtener soluciones a problemas cuantitativos en ciencias e ingeniería. 5. Analiza los datos y solución obtenidos mediante el uso de los métodos numéricos de la bisección, secante y tangente y Newton-Raphson. 	
Bibliografía de la unidad		[1] Caps. 9, 10.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
3	RA1, RA2, RA3, RA4	Algoritmos Básicos de Álgebra lineal numérica	2 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>3.1.Importancia del álgebra lineal numérica como herramienta de cálculo numérico.</p> <p>3.2.Algoritmos para la solución de ecuaciones lineales:</p> <p>3.2.1. Caso tridiagonal.</p> <p>3.2.2. Método de Gauss y descomposición LU.</p> <p>3.2.3. SVD (matrices no invertibles).</p> <p>3.2.4. Matrices poco densas.</p> <p>3.2.5. Análisis de la complejidad de los costos computacionales de los distintos algoritmos.</p> <p>3.3.Valores y vectores propios</p> <p>3.3.1. Valor propio mayor.</p> <p>3.3.2. Factorización QR.</p> <p>3.4.Implementación en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas (por ejemplo, LAPACK).</p> <p>3.5.Aplicaciones a problemas de ciencias e ingeniería en el contexto del álgebra lineal numérica.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Analiza la importancia del álgebra lineal numérica, considerando su condición de herramienta transversal para el cálculo numérico. 2. Selecciona librerías numéricas, de acuerdo a criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad. 3. Programa códigos o algoritmos para problemas de álgebra lineal tales como sistemas de ecuaciones lineales, valores propios, entre otros, considerando el uso de librerías numéricas. 4. Utiliza álgebra lineal numérica en la resolución de problemas asociados a aplicaciones en ciencias e ingeniería. 5. Analiza e interpreta los datos obtenidos mediante el uso de algoritmos de álgebra lineal numérica. 6. Ejecuta sus tareas y ejercicios, considerando estándares científicos y éticos, tales como rigurosidad, para la selección e implementación de los métodos, y honestidad y veracidad en el análisis y tratamiento de los datos. 	
Bibliografía de la unidad		[1] Caps. 2, 11.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
4	RA1, RA2, RA3, RA4	Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO)	2 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
4.1. Métodos de Euler, Runge-Kutta y Verlet. 4.2. Runge-Kutta con paso adaptativo. 4.3. Métodos implícitos para problemas <i>stiff</i> . 4.4. Implementación en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas. 4.5. Aplicaciones a problemas de ciencias e ingeniería a partir del uso de ecuaciones diferenciales ordinarias.		El/la estudiante: <ol style="list-style-type: none"> 1. Programa códigos computacionales simples para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO). 2. Determina la importancia de usar métodos de paso adaptativo, por su precisión y estabilidad. 3. Implementa en lenguaje de programación códigos para utilizar EDO, considerando criterios de eficiencia, orden de cálculo y error. 4. Utiliza las ecuaciones diferenciales ordinarias para obtener una solución a problemas cuantitativos de aplicaciones en ciencia e ingeniería. 5. Analiza e interpreta los datos obtenidos mediante el uso de métodos numéricos de Runge-Kutta y Verlet. 6. Resuelve tareas y ejercicios, con criterios de rigurosidad, honestidad y veracidad en el análisis y tratamiento de los datos y en el uso de gráficos y figuras. 	
Bibliografía de la unidad		[1] Caps. 17, 18.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
5	RA1, RA2, RA3	Solución de Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP)	3 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>5.1. Clasificación de ecuaciones en derivadas parciales (EDP).</p> <p>5.2. Ecuaciones elípticas (Laplace):</p> <p>5.2.1. Método de relajación.</p> <p>5.3. Ecuaciones hiperbólicas (ondas):</p> <p>5.3.1. Lax scheme.</p> <p>5.3.2. Ecuación de Schrodinger</p> <p>5.4. Ecuaciones parabólicas (difusión):</p> <p>5.4.1. Métodos explícitos/implícitos.</p> <p>5.4.2. Método de Crank-Nicolson</p> <p>5.5. Implementación en lenguaje de programación y uso de bibliotecas.</p> <p>5.6. Aplicaciones para problemas de ciencia e ingeniería, a partir de ecuaciones en derivadas parciales (EDP).</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Selecciona el método numérico que se requiere para obtener la solución a distintos tipos de ecuaciones en derivadas parciales, considerando ventajas y limitaciones de cada uno de ellos. 2. Programa y diseña códigos computacionales simples en la resolución de ecuaciones en derivadas parciales (EDP), considerando criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad. 3. Utiliza lenguaje de programación y/o librerías numéricas para obtener soluciones con EDP, considerando criterios de eficiencia, orden de cálculo y error. 4. Utiliza ecuaciones en derivadas parciales (EDP) y sus soluciones numéricas en el contexto de aplicaciones en ciencias e ingeniería. 5. Analiza con rigurosidad los datos y las soluciones numéricas, a partir del uso de las ecuaciones de derivadas parciales. 	
Bibliografía de la unidad		[1] Cap. 20.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
6	RA1, RA2, RA4	Métodos Espectrales	1,5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>6.1. Cálculo de transformadas de Fourier por integración directa.</p> <p>6.2. <i>Fast Fourier Transform</i> (FFT).</p> <p>6.3. Implementación en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas (FFTW).</p> <p>6.4. Aplicaciones de los métodos espectrales en problemas de ciencias e ingeniería:</p> <p>6.4.1. Cálculo de autocorrelación.</p> <p>6.4.2. Métodos seudo espectrales para EDP.</p> <p>6.4.3. Filtros pasa-bajos.</p> <p>6.5. Otras aplicaciones de métodos espectrales en problemas de ciencias e ingeniería.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Discrimina entre distintos algoritmos de transformada de <i>Fourier</i>, considerando su rapidez. 2. Utiliza la librería numérica <i>Fastest Fourier Transform of the West</i> (FFTW). 3. Resuelve problemas cuantitativos, aplicando el algoritmo de FFT. 4. Utiliza los métodos espectrales para la resolución de problemas de aplicaciones en ciencias e ingeniería y obtener soluciones. 5. Analiza e interpreta la solución numérica obtenida, por métodos espectrales, considerando las ventajas y limitaciones de estos. 6. Trabaja en sus tareas y ejercicios, considerando estándares científicos y éticos como rigurosidad, así como una entrega honesta y veraz en el análisis y tratamiento de los datos y en el uso de gráficos y figuras. 	
Bibliografía de la unidad		[1] Caps. 12, 13.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
7	RA1, RA2	Métodos Aleatorios	2,5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
7.1. Números pseudoaleatorios entre 0 y 1. 7.2. Generación de distribuciones de probabilidades continuas y discretas. Poisson, Gauss, binomial. 7.3. Cálculo de promedios estadísticos, <i>importance sampling</i> . 7.4. Implementación en lenguaje de programación y uso de librerías numéricas. 7.5. Aplicaciones de métodos aleatorios en problemas de ciencias e ingeniería. 7.6. Cálculo de integrales multidimensionales. 7.7. Otras aplicaciones de métodos aleatorios.		El/la estudiante: 1. Describe las propiedades de un generador de números pseudoaleatorios, considerando como criterio la calidad de la distribución. 2. Explica la importancia de trabajar con una distribución de números pseudoaleatorios de calidad, considerando sus aplicaciones en cálculo numérico. 3. Utiliza lenguaje de programación y/o librerías numéricas, para obtener soluciones con métodos aleatorios, considerando criterios de velocidad, memoria, facilidad de uso y versatilidad, 4. Usa métodos espectrales para generar números con distribuciones de probabilidad. 5. Aplica métodos aleatorios a la resolución de problemas numéricos relacionados con aplicaciones en ciencias e ingeniería. 6. Analiza e interpreta la solución numérica obtenida a partir del uso de métodos aleatorios como el <i>importance sampling</i> .	
Bibliografía de la unidad		[1] Cap. 7.	

E. Estrategias de enseñanza – aprendizaje:

El curso considera las siguientes estrategias de enseñanza:

- Clases expositivas.
- Resolución de problemas, utilizando lenguaje de programación y librerías numéricas.

F. Estrategias de evaluación:

El curso considera las siguientes estrategias de evaluación:

- Tareas de ejercicios con uso de lenguaje de programación, las que deben requerir en promedio una dedicación de 5 horas a la semana.
- Dos controles con ejercicios de programación y diseño computacional.

G. Recursos bibliográficos:

Bibliografía obligatoria:

- (1) Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. y Flannery, B.P. (2007). *Numerical Recipes, the Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3ra edición.
- (2) Manuales para el uso de las librerías numéricas: LAPACK, GSL, FFTW y Python-Scipy (S/f)*.

Bibliografía complementaria:

- (3) Cordero, P. (2017). *Apuntes de Métodos Numéricos*. Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas: Departamento de Física.
- (4) Antia, H.M. (2012). *Numerical Methods for Scientists and Engineers*. Springer, 1ra edición.
- (5) Hoffman, J.D. (2018) *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, CRC Press, 2da edición.
- (6) Pang, T. (2006). *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press, 2da edición.
- (7) Stickler, B.A. y Schachinger, E. (2016). *Basic Concepts in Computational Physics*. Springer 2da edición.

*Los manuales se actualizan cada año.

H. Datos generales sobre elaboración y vigencia del programa de curso:

Vigencia desde:	Otoño, 2021
Elaborado por:	Rodrigo Soto y Álvaro Núñez
Validado por:	Validación CTD del Departamento de Física
Revisado por:	Área de Gestión Curricular