

PROGRAMA DE CURSO MÉTODOS NUMÉRICOS PARA LA FÍSICA

A. Antecedentes generales del curso:

Departamento	Departamento de Física (DFI)					
Nombre del curso	Métodos Numéricos para la Física	Código del curso	FI4005	Créditos	6	
Nombre del curso en inglés	<i>Numerical Methods in Physics</i>					
Horas semanales	Docencia	3	Horario de consulta	1.5	Trabajo personal	5.5
Carácter del curso	Obligatorio	x		Electivo		
Requisitos	FI2004: Termodinámica/IQ2212: Termodinámica química, FI3102: Física moderna, FI3104: Métodos numéricos para ciencias e ingeniería					

B. Propósito del curso:

El curso tiene como propósito que los y las estudiantes utilicen y analicen algoritmos computacionales diversos para modelar sistemas físicos de mediana complejidad. El curso se enfoca primero en el modelamiento empírico de procesos físicos, usando datos experimentales u observacionales, haciendo uso de inferencia estadística. Luego, el curso se centra en el modelamiento teórico de procesos físicos difíciles de estudiar analíticamente, utilizando diversas técnicas de simulación numérica.

Además de la adquisición de herramientas computacionales para el modelamiento de sistemas físicos, el curso enfrenta a las/los estudiantes con fenómenos fundamentales de la física, entregando una posibilidad de maduración de conceptos que complementa el aprendizaje de los tópicos esenciales de la Licenciatura en Física.

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

CE5: Obtener e interpretar datos, siguiendo métodos y protocolos experimentales, trabajando en forma individual o en equipo.

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.

CG1: Comunicación académica y profesional

Leer de manera comprensiva, analítica y crítica en español. Asimismo, expresar de forma eficaz, clara, precisa e informada sus ideas, opiniones e indagaciones, adecuándose a diversas situaciones comunicativas académicas y profesionales, tanto en lo oral como en lo escrito.

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:

Los/as estudiantes lograrán los siguientes logros al término del curso:

Competencias específicas	Resultados de aprendizaje
CE5	RA1: Utiliza mediciones de cantidades físicas y de sus errores para inferir parámetros de modelos teóricos de procesos diversos, cuantificando y reportando sus incertezas.
CE7, CE8	RA2: Escribe códigos computacionales que simulan sistemas físicos sencillos, utilizando algoritmos comúnmente usados en diversas áreas de la física, considerando el ensayo y error como parte de la implementación numérica de un problema.
CE7, CE8	RA3: Analiza e interpreta sus resultados programando herramientas de visualización, así como utilizando programas disponibles a la comunidad científica.
Competencias genéricas	Resultados de aprendizaje
CG1	RA4: Reporta los resultados de su trabajo en informes técnicos, considerando un lenguaje eficaz, claro y preciso.
CG3	RA5: Reporta en sus informes los resultados obtenidos por su trabajo individual, sin falsificar ni omitir datos relevantes.

D. Unidades temáticas:

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
1	RA 1, RA 3	Inferencia Estadística	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
1.1 Inferencia clásica. 1.1.1 Valores esperados y varianzas de una medición. 1.1.2 Máxima verosimilitud y mínimos cuadrados para modelos estadísticos lineales. 1.1.3 Cálculo de regiones de confianza. 1.1.4 Bondad de ajustes: valor-p y testeo de hipótesis. 1.1.5 Método Monte Carlo para problemas no lineales o no Gaussianos 1.2 Inferencia bayesiana. 1.2.1 Cálculo de posteriores para previas con distribuciones plana y gaussiana. 1.2.2 Cálculo de errores e intervalos creíbles		El/la estudiante: 1. Calcula valores esperados de distintas mediciones, y estima los correspondientes errores de medición. 2. Utiliza mínimos cuadrados para estimar los parámetros que definen modelos teóricos de procesos experimentales u observacionales, usando datos reales. 3. Calcula y reporta las correspondientes incertezas en los parámetros de los modelos, evalúa la bondad de los ajustes y la idoneidad de las hipótesis. 4. Usa inferencia bayesiana para reducir errores e intervalos creíbles en base a distintas mediciones experimentales u observacionales de un mismo fenómeno.	
Bibliografía de la unidad		Capítulos 4, 5, 6 y 7 de [1]	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
2	RA2, RA3	Simulaciones de N partículas	3.5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
2.1 Orden de cálculo 2.1.1 Métodos $O(N^2)$ y $O(N)$ 2.2 Método PM (“particle-mesh”) en sistemas no colisionales. 2.2.1 Macropartículas y adimensionalización. 2.2.2 El algoritmo de Verlet 2.2.3 Asignación de cargas		El/la estudiante: 1. Describe el concepto de orden de cálculo e identifica las distintas estrategias para pasar de $O(N^2)$ a $O(N)$ 2. Aplica pruebas simples de escalamiento en el tiempo de cálculo en computadores personales 3. Identifica funcionamiento y desarrolla las componentes esenciales de una simulación de	

<p>2.2.4 Ecuación de Poisson: método iterativo</p> <p>2.2.5 Aplicación: inestabilidad de "dos flujos" (two-stream) en 1D</p> <p>2.3 Método P³M ("particle-particle—particle-mesh") para interacción partícula-partícula</p> <p>2.3.1 Introducción de fuerzas de rango corto</p> <p>2.3.2 Aplicación: derretimiento de capa de electrones en 2D</p> <p>2.3.3 Ejemplo de dinámica molecular</p>	<p>partículas puntuales bajo potenciales tipo Coulomb suaves, aplicables a plasmas o sistemas que gravitan.</p> <p>4. Aplica sus simulaciones a un problema electrostático simple (inestabilidad de dos flujos), e interpreta sus resultados haciendo uso de herramientas numéricas de visualización.</p> <p>5. Desarrolla las componentes esenciales de una simulación electrostática con interacción partícula-partícula (potencial no suave) usando la técnica P³M, aplicándola a un problema de transición sólido-líquido en películas de electrones.</p>
<p>Bibliografía de la unidad</p>	<p>Capítulos 2, 8 y 12 de [2] Capítulos 7 y 9.6 de [4] Capítulo 7 de [6]</p>

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
3	RA4, RA5	Ecuaciones a derivadas parciales	3,5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>3.1. Clasificación de EDP en hiperbólicas, parabólicas y elípticas</p> <p>3.2. Discretización temporal: métodos implícitos y explícitos</p> <p>3.3. Métodos de discretización espacial:</p> <p>3.3.1. diferencias finitas</p> <p>3.3.2. volúmenes finitos para ecuaciones de flujo</p> <p>3.3.3. elementos finitos y formulación débil de las EDP</p> <p>3.4. Métodos espectrales y seudoespectrales</p> <p>3.5. Análisis de resultados</p> <p>3.5.1. Diagramas espacio-temporales</p> <p>3.5.2. Propiedades espectrales</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Identifica los efectos de las diferentes estrategias de discretización temporal y espacial para garantizar precisión, estabilidad y la conservación de magnitudes físicas relevantes. 2. Construye la formulación débil de una EDP y describe su aplicación a la solución mediante elementos finitos. 3. Aplica métodos seudoespectrales para la resolución de ecuaciones de reacción-difusión no lineales 4. Aplica métodos de análisis de resultados 5. Enuncia cómo se aplican los métodos de solución de EDP para problemas canónicos de física. 	

<p>3.5.3. Funciones correlación 3.6. Problemas canónicos: fluidos viscosos e invíscidos, ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, ecuaciones de reacción- difusión, magnetohidrodinámica, Laplace-Poisson</p>	
<p>Bibliografía de la unidad</p>	<p>Capítulos 6, 7 y 9 de [4] Capítulo 13 de [3] Capítulos 13 y 20 de [5]</p>

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
4		Métodos numéricos en mecánica cuántica	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>4.1. Autoestados en problemas unidimensionales 4.1.1. Reducción de problemas tridimensionales a una dimensión 4.1.2. Condiciones de borde y compactificación 4.1.3. Diagonalización directa en base de coordenadas o en estados localizados. Costo computacional. 4.1.4. Método de <i>shooting</i> 4.2. Estado fundamental con muchos grados de libertad 4.2.1. Principio variacional 4.2.2. Algoritmo de Metrópolis-Hastings para el muestreo de importancia e integración multidimensional 4.2.3. Fermiones y bosones 4.2.4. Condiciones de cúspide 4.2.5. Método Monte Carlo variacional 4.2.6. Optimización y condición de convergencia</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Identifica la dificultad numérica de resolver el problema de autoestados en mecánica cuántica mediante diagonalización directa. 2. Realiza las transformaciones necesarias para llevar un problema uni o tridimensional a uno unidimensional con condiciones de borde nulas en un dominio compacto. 3. Calcula las primeras autoenergías y autofunciones de un problema unidimensional mediante el método de <i>shooting</i>. 4. Implementa el algoritmo de Metrópolis-Hastings para el muestreo eficiente de distribuciones de probabilidad y la integración multidimensional. 5. Aplica el método Monte Carlo variacional para calcular el estado fundamental de sistemas de varios grados de libertad (átomo de Helio). 6. Construye adecuadamente funciones de prueba fermiónicas o bosónicas para el estado fundamental de sistemas de dos partículas. 7. Describe la aproximación de Born-Oppenheimer y su aplicación para la generación de potenciales y dinámicas de iones. 	

<p>4.3. Dinámica de Born-Oppenheimer</p> <p>4.3.1. Aproximación de Born-Oppenheimer</p> <p>4.3.2. Potencial efectivo y configuraciones de equilibrio</p> <p>4.3.3 Dinámica molecular de iones.</p>	
<p>Bibliografía de la unidad</p>	<p>Capítulo 4 y 10 de [4]</p> <p>Capítulo 3, 9, 10 y 12 de [3]</p> <p>Capítulos 11 y 18 de [5]</p>

E. Estrategias de enseñanza - aprendizaje:

La propuesta considera:

- Clases de cátedra expositivas
- Un horario fijo de consultas relativo al desarrollo de las tareas
- Trabajo semanal de los estudiantes en el desarrollo de proyectos computacionales, con entregas semanales de los resultados parciales y finales. Cada unidad tendrá uno o dos proyectos.

F. Estrategias de evaluación:

La evaluación contempla las siguientes instancias:

- Toda la evaluación del curso consiste en el desarrollo de tareas semanales o quincenales por parte de los estudiantes. Estas tareas tendrán partes teóricas de análisis de distintos métodos numéricos y partes prácticas para la resolución de un proyecto.
- Cada unidad tendrá uno o dos proyectos, cada uno de los cuales consistirá en la solución, mediante la programación de los métodos computacionales vistos en clase, de algún problema físico de mediana complejidad. La implementación, solución y análisis de estos proyectos se entregará en informes semanales o quincenales.
- Cuando sea posible, se comparará los resultados del cálculo numérico implementado en los proyectos con soluciones analíticas de casos límite, con otros métodos numéricos o con resultados experimentales.
- Además de los métodos que sean evaluados mediante los proyectos, otros métodos serán evaluados de manera teórica, analizando y discutiendo sus características.

G. Recursos bibliográficos:

Bibliografía obligatoria

[1] "Data Analysis Techniques for Physical Scientists"; C. Pruneau (1era edición, Cambridge University Press, 2017)

[2] "Computer Simulation Using Particles"; R. W. Hockney & J. W. Eastwood (Taylor and Francis, 1998)

[3] "Computational Physics"; J. M. Thijssen (2da edición, Cambridge University Press, 2007)

[4] "An Introduction to Computational Physics"; Tao Pang (2da edición, Cambridge University Press, 2006)

Bibliografía complementaria:

[5] "Numerical Recipes"; W. H. Press et al. (3ra edición, Cambridge University Press, 2007)

[6] "Métodos Numéricos"; Patricio Cordero

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

Vigencia desde:	Primavera, 2021
Elaborado por:	Mario Riquelme, Rodrigo Soto
Validado por:	CTD de Física
Revisado por:	Área de Gestión Curricular