



**VNIVERSIDAD
D SALAMANCA**

**CONVOCATORIA DE AYUDAS DE LA UNIVERSIDAD DE SALAMANCA
A PROYECTOS DE INNOVACIÓN Y MEJORA DOCENTE**

CURSO 2013-2014

Memoria de Actividades

TÍTULO DEL PROYECTO

Elaboración de materiales docentes para la asignatura «Física Computacional»

REFERENCIA

ID2013/234

PROFESOR COORDINADOR

Antonio González Sánchez

MIEMBROS DEL EQUIPO

Luis López Díaz

David Rodríguez Entem

Jesús Enrique Velázquez Pérez

OBJETIVOS DEL PROYECTO

El objetivo fundamental de este proyecto es la generación de contenidos y su puesta a disposición de los estudiantes de la asignatura Física Computacional, perteneciente al cuarto curso del Grado en Física.

Estos contenidos incluyen una introducción teórica de los principios empleados en la asignatura, así como un conjunto de programas informáticos con dos finalidades:

- Por un lado, programas de apoyo que ayuden a los estudiantes con diversos aspectos de la asignatura. Por ejemplo, programas que permitan a los alumnos la representación gráfica de los resultados obtenidos.
- Por otro lado, programas dirigidos a abordar problemas físicos concretos que los estudiantes han estudiado previamente en el Grado.

ACTUACIONES

En lo que respecta a materiales de apoyo de aplicación en la asignatura las actuaciones han sido las siguientes:

- Creación y puesta a disposición de los estudiantes de transparencias correspondientes a todos los temas de la asignatura.
- Escritura de textos de introducción teórica de la asignatura, pensados como complemento del anterior.
- Creación de un tutorial y programas con ejemplos del uso de la herramienta gráfica `pgplot`. Previamente han sido evaluadas otras alternativas (`gnufor2`, `gnuplotfortran`), pero se ha preferido aquella por su versatilidad y su sencillez de uso.
- Adquisición de libros sobre la asignatura. Estos libros se han empleado para la realización de los puntos anteriores, pero además quedan depositados de forma permanente en la biblioteca para su utilización por parte de futuros estudiantes.

Por otro lado, se ha comenzado a realizar la recopilación de programas destinados a resolver problemas que pueden aparecer en diversos momentos a lo largo de los estudios de Grado. Esta recopilación va a ser actualizada de forma continua de modo que los estudiantes vayan disponiendo de más problemas.

Finalmente, una evaluación del proyecto no se ha podido llevar a cabo ya que fue concedido a finales del primer cuatrimestre y gran parte del material no ha podido ser puesto a disposición de los estudiantes.

RESULTADOS

Material de apoyo para la asignatura:

Finalizado el proyecto, se dispone de los siguientes elementos:

- Transparencias. Este material abarca todos los contenidos del curso y ha sido puesto a disposición de los estudiantes desde el principio de la asignatura (v. figura 1).

Esquema de Metropolis

- Partimos de un punto i y vamos a un punto f
- Por ejemplo, $f = i + \Delta$, donde Δ es aleatorio
- Cada punto tiene su probabilidad:

$$p(i) \propto e^{-\beta H(i)} \quad \text{ídem para } f$$

- Sea $\pi(i \rightarrow f)$ la probabilidad de ir de i a f



Figura 1. Ejemplo de transparencia

- Textos de introducción. Se ha alcanzado el 50% de los contenidos de la asignatura, aunque no han podido ser puestos a disposición de los estudiantes por problemas de tiempo (v. figura 2). En el anexo I se incluye el índice correspondiente a este material

y un ejemplo de su uso puede ser el siguiente:

```

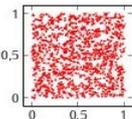
PROGRAM ALEATORIO
REAL r(5), x
CALL init_random_seed()
CALL RANDOM_NUMBER(x)
PRINT*, x
CALL RANDOM_NUMBER(r)
PRINT*, (r(i), i=1, 5)
STOP
END

```

Como se ve, la rutina se puede llamar para que calcule un único número aleatorio o una matriz completa de ellos. Aunque no se muestra en el ejemplo, también puede utilizarse para generar números aleatorios enteros. La subrutina `init_random_seed` (estará accesible en Studium o bien se puede obtener en Internet) sirve para que en cada ejecución del programa se emplee una semilla diferente, obteniendo así secuencias de números aleatorios diferentes.

1.2. Distribuciones de probabilidad

Lo más habitual cuando se trabaja con generadores de números aleatorios es sacar números reales uniformemente distribuidos entre 0 y 1. Eso significa que se sortean según una distribución $f(x)$ dx con

$$f(x) = \begin{cases} 1 & x \in [0, 1] \\ 0 & \text{else.} \end{cases}$$


Sin embargo, a veces es necesario disponer de números aleatorios distribuidos según otras distribuciones de probabilidad. La primera forma de

Figura 2. Ejemplo de texto complementario.

- Se dispone de un breve tutorial de consulta para el uso de `pgplot`, así como de varios programas con ejemplos del uso de esa herramienta gráfica (v. figura 3)

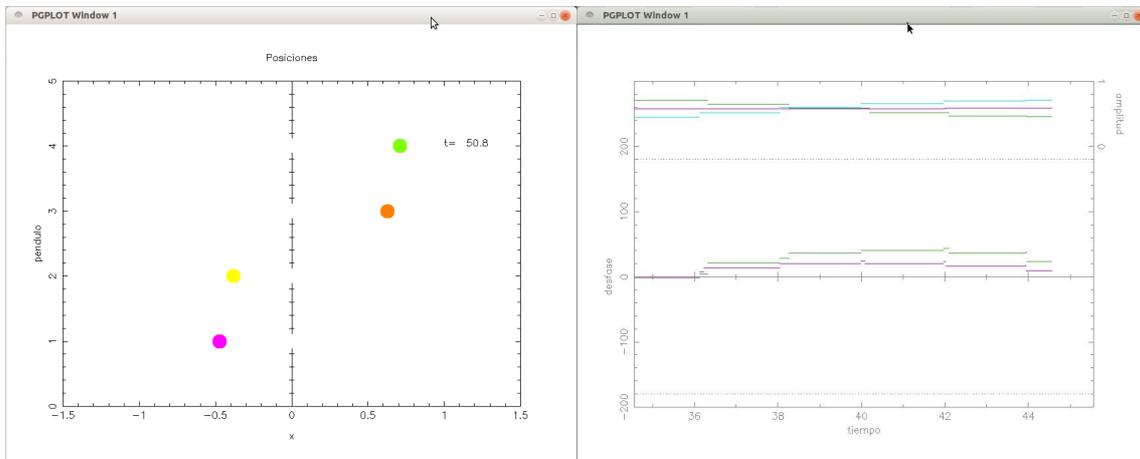


Figura 3. Ejemplos de gráficas generadas con `pgplot`.

Material de utilidad en otras asignaturas:

Respecto a los programas que podrán ser empleados en otras asignaturas del Grado, se ha recogido un cierto número de ellos, algunos de los cuales son los siguientes:

- Tuberías enterradas bajo el suelo
- Potencial eléctrico en un recinto cerrado
- Estudio del átomo de berilio mediante Hartree-Fock
- Ondas en una cuerda
- Análisis espectral de señales aleatorias y determinísticas
- Medida de $g(r)$ en un fluido de esferas duras

Esta parte del proyecto puede considerarse algo dinámico, de modo que esperamos que el número de problemas disponible vaya aumentando con el tiempo.

Por otro lado, también se ha conseguido incrementar la bibliografía sobre el tema a disposición de los estudiantes en la biblioteca. Se ha solicitado la compra de dos libros sobre la materia, pero a fecha de redacción de esta memoria solo uno de ellos ha sido adquirido.

La concesión de este proyecto se hizo pública cuando ya había transcurrido la mayor parte del tiempo asignado a esta asignatura. Por ello no ha sido posible disponer de todos los materiales ni mucho menos de ponerlos a disposición de los estudiantes. De cara al próximo curso se espera que los estudiantes puedan acceder a la totalidad de estos elementos. Entonces será el momento de evaluar su utilidad para ellos.

Índice general

1. Sistemas de ecuaciones lineales	3
1.1. Introducción	3
1.2. Problemas con matrices triangulares	7
1.3. Factorización LU	8
1.4. Factorización de Cholesky	9
1.5. Eliminación gaussiana.	11
1.6. Factorización LU con pivoteo	12
1.7. Problemas de autovalores	18
2. Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales	29
2.1. Introducción	29
2.2. Ecuaciones de tipo hiperbólico	34
2.3. Ecuaciones de tipo parabólico	49
2.4. Ecuaciones de tipo elíptico	64
3. Métodos de simulación en Física	79
3.1. Generación de números aleatorios	79
3.2. Distribuciones de probabilidad	81
3.3. Integración Monte Carlo	83
3.4. Simulaciones en Física	86
4. Modelización de datos y técnicas de Fourier	99
4.1. Variables aleatorias. Momentos de una función de distribución. Correlación lineal	99
4.2. Modelización de datos. Mínimos cuadrados	110
4.3. Discretización. Teorema del muestreo (Shannon-Nyquist). Series temporales	116
4.4. Análisis en el dominio del tiempo. Función de autocorrelación. Correlación cruzada	122
4.5. Análisis espectral. Transformada de Fourier: Algoritmos DFT y FFT .	128
4.6. Densidad espectral de potencia. Teorema de Wiener-Khintchine . . .	144