

# Cursos de Física Computacional

Propuesta de: Fernando Rojas R.

## *Observaciones y Criterios Generales.*

- Sobre el nombre de las asignaturas: teniendo en cuenta que la forma en la que se planea impartir el material es partir de problemas concretos cuya solución depende del uso de las técnicas numéricas y/o de cómputo se propone que las dos asignaturas obligatorias de las licenciaturas de Física y Física Aplicada se denominen «Física Computacional I» y «Física Computacional II». Otras opciones son las mencionadas «Herramientas Computacionales» o una combinación como «Herramientas Computacionales de la Física».

- Se sugiere que exista una asignatura optativa como «Tópicos de Física Computacional» (y otros) para efecto de tener un espacio abierto a propuestas de cursos específicos por parte de nuestros profesores o bien de visitantes, estancias, etc.

- Sobre el uso de software: parece ser necesario que el software utilizado en los cursos que se imparten en la FCFM deberá ser «libre» (freeware) en el entendido de que, por un lado no requiere licencias de uso para la Fac. y, por otro, que los estudiantes tengan acceso al uso del mismo software en sus respectivas computadoras (dado el caso). Ejemplos: gnuplot, gtybalt, maxima, octave y/o scilab, yacas, c, c++, fortran (gcc), python, scidavis.

- Recomendable ir mezclando, desde el inicio, la física: Mecánica y electromagnetismo para el curso I y Mecánica Teórica (de ser posible hasta Sistemas Hamiltonianos, no lineales), Difusión (en general), Mecánica Estadística, etc. para el curso II

## *Contenidos.*

El primer capítulo del curso I permite introducir muchos conceptos de la Física, sobre todo en términos de las ecuaciones paramétricas:  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$  pueden ser, en general, soluciones de ecuaciones de movimiento.

Los capítulos 3 y 4 del curso I deberían darse simultáneamente. Los temas están separados por área de conocimiento, pero la idea es que los problemas de la Física impliquen aprender las técnicas de cómputo.

## Física Computacional I

### 1. Gnuplot

- 1.1 Gráficas de funciones simples de una y dos variables
- 1.2 La orden «set» para modificar formato, estilo, etc.
- 1.3 Modo paramétrico en dos y tres dimensiones. Trayectorias de Móviles.
  - 1.3.1 Variables por defecto de gnuplot
  - 1.3.2 Construcción de curvas paramétricas en dos y tres dimensiones
  - 1.3.3 Ecuaciones de Movimiento (cinemática)
  - 1.3.4 Superficies paramétricas
- 1.4 Tipos de salidas (postscript, jpeg, png, pdf, etc.)
- 1.5 Animación
  - 1.4.1 Estructura de «script» para gnuplot
  - 1.4.2 órdenes importantes: every, reread, if, etc.

### 2. LaTeX

- 2.1 Estructura general de un texto en LaTeX
- 2.2 El preámbulo
- 2.3 Ecuaciones y expresiones matemáticas
- 2.4 Secciones y Capítulos
- 2.5 Inserción de imágenes

### 3. Estructura y sintaxis de lenguajes de programación

- 3.1 Estructuras básicas de programación

- 3.1.1 Las lógicas
  - 3.1.1.1 Programación secuencial
  - 3.1.1.2 Decisión o bifurcación
  - 3.1.1.3 Iteración o reptición
  - 3.1.1.4 Modularidad. Construcción y uso de funciones y módulos.
- 3.1.2 Las de Datos
  - 3.1.2.1 Datos «escalares» (sin estructura)
  - 3.1.2.2 Arreglos o Listas. Representación de Vectores y Matrices. Manejo de índices
  - 3.1.2.3 Registros(\*)
  - 3.1.2.4 Objetos
- 4. **Cinemática y dinámica discretas**
  - 4.1 Dinámica de las formas  $dx/dt = F(x)$  en el espacio fase  $(x, \dot{x})$  de coordenadas y velocidades.
  - 4.2 Discretización de la velocidad:  $\Delta x / \Delta t = F(x) \rightarrow x_{t+1} = x_t + \Delta t F(x_t)$ . El método de Euler.
  - 4.3 El caso acelerado
    - 4.3.1 Aproximación de la segunda derivada ¿Se puede resolver el problema?
    - 4.3.2 Algoritmo de velocidades de Verlet. El problema de los tres cuerpos (o más).
  - 4.4 Fuerzas: Separación en ecuaciones diferenciales de primer orden (Sistemas Hamiltonianos).
    - 4.4.1 Soluciones en función del tiempo.
    - 4.4.2 Soluciones en el espacio fase  $(x, \dot{x})$ . Puntos Fijos y Ciclos límite.
  - 4.5 Sistemas Dinámicos: una extensión del espacio fase.
    - 4.5.1 Dinámica de reacciones químicas
    - 4.5.2 El modelo de clima de Lorenz.

## Física Computacional II

- 1. **Oscilaciones Mecánicas en el espacio fase**
  - 1.1 Oscilador Armónico.
  - 1.2 Oscilador Forzado. Atractor.
  - 1.3 Oscilador Amortiguado. Atractor y Puntos Fijos
- 2. **Oscilaciones No Lineales en dos y tres dimensiones**
  - 2.1 Reacciones Químicas Autocatalíticas.
  - 2.2 Modelo del clima de Lorenz. Caos
  - 2.3 Oscilaciones de Rossler. Atractor
- 3. **Estadística y Simulación**
  - 3.1 Estimación de magnitudes simples ( $\pi$ , volúmenes, integrales, etc.)
  - 3.2 Procesos físicos (gas ideal, difusión Ehrenfest)
  - 3.3 Movimiento Browniano. Cálculo del coeficiente de Difusión. Correlaciones
  - 3.4 Caminatas deterministas. Procesos irreversibles.
  - 3.5 Principios de Dinámica Molecular y Montecarlo.
- 4. **Ecuaciones Diferenciales Parciales**
  - 4.1 La ecuación de difusión. Solución Analítica (Modelo de Einstein)
  - 4.2 Ecuación de Onda. Ecuaciones de Maxwell
  - 4.3 Sistemas de Reacción-Difusión. Ejemplos de Física, Biología, Química, etc.
  - 4.4 Fluidos. Formación de Patrones en mezclas.
- 5. \* **Estructuras Recursivas y Fractales<sup>1</sup>**
  - 5.1 Funciones Recursivas
  - 5.2 Construcciones fractales formales
  - 5.3 L-systems. Morfología de plantas, sistema nervioso, circulatorio, etc.

---

1. Esta unidad es opcional.

## Comentarios:

- No sé cómo integrar los capítulos 3 y 4 del primer curso: la idea es más bien que las estructuras de programación y de datos se vayan aplicando y comparando sobre ejemplos concretos. Tal vez hacer dos versiones de varios ejemplos (por ejemplo usando listas y/o archivos). Supongo que eso puede especificarse en la versión final.
- Los primeros dos capítulos del segundo curso están dirigidos a un enfoque amplio de dinámica de sistemas con la idea explícita de no «cerrar» los temas a problemas asociados tradicionalmente a la física.
- La unidad 3 está dirigida a sistemas de muchas partículas, interacciones, algoritmos para obtener información de un proceso y/o simulación, etc.
- La unidad 4 es conceptualmente más elaborada y las técnicas también lo son. Aunque básicamente uno siempre puede usar (como sugieren muchos libros) el método de Euler mezclado con aproximaciones en diferencias finitas, por ejemplo para el operador de Laplace.

## Bibliografía

- *A First Course in Computational Physics*, Paul L. DeVries, Jhon Wiley & Sons, 1994.
- *Análisis Numérico*, Richard L. Burden y J. Douglas Faires, International Thomson Editores, 1998.
- *Nonlinear Dynamics and Chaos (with applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering)*, Steven H. Strogatz, Westview Press, 1994
- *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*, Albert Einstein, Dover Publications Inc. 1956.
- *Introduction to Classical Mechanics*, Jerry B. Marion,
- *Python Scripting for Computational Science*, Hans Petter Langtangen, Springer-Verlag, 2004.
- *Chaos and Fractals New Frontiers of Science*, Heinz Otto Peitgen, Hatmut Jurgens y Dietmar Saupe, Springer-Verlag, 1992.
- *Modeling Complex Systems*, Nino Boccara, Springer-Verlag, 2004.
- *Teaching statistical physics by thinking about models and algorithms*, Tobochnik, Jan and Gould, Harvey, Am. J. Phys., **76** (2008) 353-359.
- *Computational Physics Education with Python*, Báker, Arnd, Computing in Science & Engineering, may-jun (2007) 30-33.
- *Python for Education: Computational Methods for Nonlinear Systems*, Myers, Christopher R. and Sethna, James P., arXiv:0704.3182v1 [nlin.CD] (2007).
- *A model-based view of physics for computational activities in the introductory physics course*, Buefler, Andy; Pillay, Seshini; Lubben, Fred and Fearick, Roger, Am. J. Phys., **76** (2008) 431-437.
- *Computation in undergraduate physics: The Lawrence approach*, Cook, David M., Am. J. Phys., **76** (2008) 321-326.
- *Computation in Classical Mechanics*, Timberlake, Todd and Hasbun, Javier E., Am. J. Phys., **76** (2008) 334-339.
- *A project-oriented course in computational physics: Algorithms, parallel computing, and graphics*, Rebbi, C., Am. J. Phys., **76** (2008) 314-320.

- *The Computational Beauty of Nature (Computer Explorations of Fractals, Chaos, Complex Systems and Adaptation)*, Gary William Flake, The MIT Press, (2001).
- *An Introduction to Stochastic Processes in Physics*, Don S. Lemons, The John Hopkins University Press, (2002).