

Any acadèmic	2017-18
Assignatura	21024 - Física Computacional
Grup	Grup 1, 1S, GFIS
Guia docent	B
Idioma	Català

Identificació de l'assignatura

Nom	21024 - Física Computacional
Crèdits	2,4 de presencials (60 hores) 3,6 de no presencials (90 hores) 6 de totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 1S, GFIS (Campus Extens)
Període d'impartició	Primer semestre
Idioma d'impartició	Català

Professors

Professor/a	Horari d'atenció als alumnes					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Romualdo Romero March romu.romero@uib.es	Cal concertar cita prèvia amb el/la professor/a per a fer una tutoria					
	16:00	17:30	Dimecres	04/09/2017	31/07/2018	F108 (Primer pis, Ed. Mateu Orfila)
Arnau Amengual Pou arnau.amengual@uib.es	13:00	14:00	Divendres	04/09/2017	31/07/2018	F108 (Primer pis, Ed. Mateu Orfila)

Contextualització

Física Computacional és una assignatura fonamental de tercer curs que completa l'aprenentatge de les assignatures agrupades a la Matèria del mateix nom, *Física Computacional*. En particular, aquesta és la continuació natural de l'assignatura bàsica de primer curs:

* *Física assistida per ordinador*, on s'aprèn un llenguatge de programació i les eines necessàries per a la representació gràfica de dades científiques.

A l'assignatura *Física Computacional* es desglossen les característiques de les equacions diferencials estudiades a les assignatures *Equacions diferencials I i II*, i s'estudien els mètodes i tècniques numèriques necessaris per a resoldre-les.

Així doncs, l'assignatura aborda uns continguts transversals en la física, que són d'aplicació en totes i cada una de les seves branques, amb especial importància a les matèries més aplicades com, per exemple, les de l'àmbit de la geofísica, l'astrofísica, la cosmologia o la física quàntica i nuclear.

En aquesta assignatura l'estudiant aprendrà a identificar les particularitats d'un problema físic a través de l'anàlisi de les equacions matemàtiques que el modelen i coneixerà els mètodes disponibles per a la seva resolució numèrica. Així doncs, el curs s'iniciarà treballant exemples senzills d'equacions diferencials ordinàries per a passar en breu a l'estudi d'equacions en derivades parcials, models de la gran majoria de sistemes físics reals. Per a afrontar l'estudi dels mètodes disponibles de resolució d'aquestes equacions, es farà necessari entendre conceptes clau que permeten diagnosticar l'eficàcia dels mètodes numèrics aplicats. Donada la transversalitat i caràcter aplicat dels continguts d'aquesta assignatura, l'aprenentatge es fonamentarà en dos principis pedagògics bàsics. Per una banda, l'ús continuu de casos pràctics en forma de situacions físiques quotidianes de referència que contextualitzin el problema físico-matemàtic a resoldre amb les tècniques numèriques; i per l'altra, l'assignatura conté nombroses activitats pràctiques en les que l'estudiant haurà de

Guia docent

posar en pràctica les tècniques discutides a les classes teòriques i descobrir eventualment per si mateix l'eficàcia dels mètodes numèrics provats.

Pel que fa a l'orientació professional, les competències que es treballen a *Física Computacional* esdevenen el fonament per a cursar un ventall d'assignatures del Grau de Física molt orientades a l'habilitació professional del graduat. Així doncs, aquesta assignatura és imprescindible per a Graduats en Física que vulguin desenvolupar la seva carrera professional en àmbits amb forta component de mètodes numèrics com són la modelització atmosfèrica i oceanogràfica (per exemple relacionada amb la predicció del temps o del clima), la cosmologia (per exemple gravitació numèrica), l'astrofísica (per exemple la física solar) o la física de materials. Així mateix, per a Graduats en Física amb vocacions més relacionades amb les enginyeries, aquesta assignatura dota de competències valorades als àmbits professionals de les enginyeries aeronàutica, hidràulica o econòmico-financera. Per últim, cal subratllar el valor d'aquesta assignatura en les competències d'un Graduat en Física a l'hora d'emprendre una carrera investigadora en les disciplines de la física anteriorment esmentades, i amb forta component numèrica en les seves activitats de recerca.

Requisits

Tot i no comptar amb cap requisit formal per a matricular-s'hi, les activitats d'aquesta assignatura es centren en l'ús d'ordinadors per a resoldre problemes físics. Per tant, per una banda és convenient tenir un bagatge en reconeixement i resolució d'equacions diferencials. Per l'altra, el maneig general dels ordinadors (en qualsevol sistema operatiu d'ús corrent: Windows, macOS o Linux) facilitarà en gran mesura el seguiment i realització dels treballs pràctics.

Recomanables

És convenient haver cursat l'assignatura "Equacions diferencials II" de segon curs per a tenir els fonaments matemàtics necessaris per a assolir amb garanties els objectius d'aprenentatge teòric i conceptual d'aquesta assignatura. A més, i donat el fort caràcter numèric de les activitats plantejades per a assolir les competències de la matèria, és molt recomanable haver superat l'assignatura bàsica "Física assistida per ordinador".

Competències

Les competències que es treballen en aquesta assignatura orbiten al voltant de la resolució d'equacions diferencials per mitjà d'eines numèriques.

Específiques

- * Saber escriure programes amb un llenguatge de programació científic, utilitzar programes de càlcul simbòlic i usar programes per a l'anàlisi de dades i la presentació d'informes.
- * Demostrar posseir i comprendre coneixements de mètodes i tècniques matemàtics a un nivell que permeti una formulació avançada de les teories físiques i la resolució de problemes de forma eficient.

Genèriques

- * Capacitat d'anàlisi i síntesi.
- * Capacitat d'organitzar i planificar.
- * Motivació per la qualitat.

Guia docent

Bàsiques

* Podeu consultar les competències bàsiques que l'estudiant ha d'haver assolit en acabar el grau a l'adreça següent: http://estudis.uib.cat/ca/grau/comp_basiques/

Continguts

Els continguts de l'assignatura els classificam en 2 blocs. Un primer bloc introdueix les eines i conceptes bàsics per a la resolució numèrica d'equacions físiques, i a la segona part ja aprofundim en aquests conceptes i mètodes aprenent a resoldre equacions en derivades parcials de segon ordre.

Continguts temàtics

Bloc 1. Introducció als mètodes numèrics

Tema 1. Introducció i repàs

Ciència i computació. Mètodes numèrics. Algorismes i llenguatges de programació. Computadors: avantatges i limitacions.

Tema 2. Equacions diferencial ordinàries

Mètodes d'Euler. Mètodes de Runge-Kutta i Fehlberg. Equacions de segon ordre. Equacions vectorials. Condicions de contorn. Problemes de vectors propis.

Tema 3. Conceptes bàsics i fonamentals

Discretització d'equacions. Diferències finites. Error de truncació. Consistència, convergència i estabilitat.

Bloc 2. Equacions en derivades parcials

Tema 4. EDPs. Identificació i característiques

Introducció. Identificació d'EDPs. Principals sistemes físics.

Tema 5. Equacions parabòliques en 1D

Equació de propagació de la calor. Mètode FTCS. Consistència, convergència i estabilitat. Mètode implícit BTCS. Mètode de Cranck-Nicolson. Principi de màxim. Condicions de Neumann. Medis inhomogenis.

Tema 6. Equacions parabòliques en 2D

Mètode FCTS. Mètode de Peaceman-Rachford (ADI). Condicions de contorn.

Tema 7. Equacions hiperbòliques

Advecció lineal. Línees característiques. Mètode upwind. Convergència i consistència. CFL i anàlisi de Fourier. Mètode de Lax-Wendorff. Lleis de conservació. Esquema de Leap-Frog. Caracterització d'errors. Condicions de contorn.

Tema 8. Equacions el·líptiques

Equacions de Laplace, Poisson i Helmholtz. Mètodes directes i iteratius. Diferències finites: relaxació i sobre-relaxació. Convergència i optimització.

Metodologia docent

Any acadèmic	2017-18
Assignatura	21024 - Física Computacional
Grup	Grup 1, IS, GFIS
Guia docent	B
Idioma	Català

Detallam aquí les activitats a realitzar durant el curs per a facilitar l'aprenentatge de les competències assignades i avaluar-ne el nivell d'assoliment. Descriurem tant les activitats de treball presencial conduïdes pel professor com les de treball autònom que l'estudiant ha de realitzar per compte propi, recolzant-se en la bibliografia de l'assignatura, i els materials disponibles a l'Aula Virtual (Campus Extens) o en una pàgina web creada a aquest efecte. En aquest sentit, hi podeu trobar activitats de treball autònom que us permetran adquirir competències avançades addicionals en Física Computacional.

Volum de treball

Per la seva naturalesa amb clars lligams amb aplicacions pràctiques, aquesta és una assignatura amb una forta component pràctica. Això es reflecteix tant en el volum de treball com en la metodologia d'avaluació. Les activitats de l'assignatura estan dissenyades per a que l'estudiant realitzi 90 hores de treball autònom, del qual prop de dos terços s'espera que es dediquin a l'el·laboració autònoma d'informes de les pràctiques numèriques que es realitzen a les sessions presencial de laboratori.

Tot i que el promig de dedicació per pràctica són unes 12h de treball autònom, la primera pràctica suposa típicament una càrrega superior, essent d'un 15 h la càrrega esperada per a l'el·laboració de la primera pràctica, i unes 10-12 h per les 4 restants.

Activitats de treball presencial

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
Classes teòriques	Classes magistrals	Grup gran (G)	Es presentaran els fonaments teòrics i exemples il·lustratius d'equacions i el mètodes numèrics per a resoldre-les. Les classes teòriques ocupen 25 hores.	25
Classes pràctiques	Demostracions pràctiques	Grup gran (G)	Es mostraran les tècniques de resolució numèrica d'equacions amb programes de FORTRAN o de càlcul simbòlic que ajudin a entendre i aprendre l'àmbit d'aplicació de les teories vistes a les classes teòriques.	5
Classes pràctiques	Pràctiques de laboratori I, II i III	Grup mitjà (M)	Mitjançant l'elaboració d'uns programes (en llenguatge FORTRAN o un altre equivalent) i els corresponents informes, els estudiants hauran de resoldre equacions i dur a terme tasques especificades a un guió. Les pràctiques presencials consten de 5 sessions a les quals els estudiants hauran de resoldre 3 pràctiques. De cada una d'aquestes s'ha d'entregar un informe argumentat i discutit adequadament, on es demostrï el domini tant del fonament teòric com de la implementació del procediment.	10
Classes pràctiques	Pràctiques de laboratori IV i V	Grup mitjà (M)	Mitjançant l'elaboració d'uns programes (en llenguatge FORTRAN o un altre equivalent) i els corresponents informes, els estudiants hauran de resoldre equacions i dur a terme tasques especificades a un guió. Les pràctiques presencials consten de 4 sessions a les quals els estudiants hauran de resoldre 2 pràctiques. De cada una d'aquestes s'ha d'entregar un informe argumentat i discutit adequadament, on es demostrï el domini tant del fonament teòric com de la implementació del procediment.	6
Tutories ECTS	Resolució de problemes	Grup mitjà 2 (X)	En aquestes sessions, els estudiants resoldran problemes teòrics sobre desenvolupaments matemàtics relatius a mètodes numèrics plantejats a les classes de teoria. També es	10

Any acadèmic	2017-18
Assignatura	21024 - Física Computacional
Grup	Grup 1, IS, GFIS
Guia docent	B
Idioma	Català

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
			resoldran demostracions numèriques curtes plantejades a les classes teòriques.	
Avaluació	Examen	Grup gran (G)	Al final del semestre l'alumne haurà de superar un examen on podrà demostrar la seva competència en els mètodes i tècniques de resolució numèrica d'equacions físiques vistes al llarg del curs. L'examen durarà 4 hores. Es fa notar que a meitat del quadrimestre a l'alumne se li oferirà l'opció de realitzar un examen parcial. En cas de treure una nota igual o superior a un 4, això li permetrà eliminar la primera part de la matèria del curs de cara a l'examen global. La nota de l'examen vendria donada per la mitja entre les qualificacions de la primera i segona part.	4

A començament del semestre hi haurà a disposició dels estudiants el cronograma de l'assignatura a través de la plataforma UIBdigital. Aquest cronograma inclourà almenys les dates en què es faran les proves d'avaluació contínua i les dates de lliurament dels treballs. A més, el professor o la professora informará els estudiants si el pla de treball de l'assignatura es durà a terme a través del cronograma o per una altra via, inclosa la plataforma Campus Extens.

Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Estudi teòric	L'estudiant haurà d'aprofundir en la matèria a través de la consulta de la bibliografia de l'assignatura i la resolució de les demostracions i petites tasques numèriques assignades durant les classes teòriques i a resoldre a les classes de tutoria.	30
Estudi i treball autònom individual o en grup	Elaboració de pràctiques i informes	A partir de les activitats realitzades a les 9 sessions de pràctiques de laboratori, l'estudiant haurà de finalitzar els càlculs i elaboració dels programes que resolguin les tasques assignades al guió. Per a cada pràctica, s'haurà d'entregar un informe argumentant i discutint els mètodes i resultats emprats per a resoldre la pràctica.	60

Riscs específics i mesures de protecció

Les activitats d'aprenentatge d'aquesta assignatura no comporten riscos específics per a la seguretat i salut dels alumnes i, per tant, no cal adoptar mesures de protecció especials.

Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

En cas de no superar l'assignatura a la convocatòria de febrer (això és, nota ponderada inferior a 5 o alguna activitat no presentada o amb nota inferior al mínim requerit d'un 4), es podran conservar les activitats ja superades (...això vol dir amb nota igual o superior a 5) per a la convocatòria extraordinària de recuperació. No es permet repetir activitats ja aprovades per "pujar" nota. L'examen parcial permet eliminar matèria per a l'examen global de Febrer, no per al de recuperació.

Guia docent

Pràctiques de laboratori I, II i III

Modalitat	Classes pràctiques
Tècnica	Informes o memòries de pràctiques (recuperable)
Descripció	Mitjançant l'elaboració d'uns programes (en llenguatge FORTRAN o un altre equivalent) i els corresponents informes, els estudiants hauran de resoldre equacions i dur a terme tasques especificades a un guió. Les pràctiques presencials consten de 5 sessions a les quals els estudiants hauran de resoldre 3 pràctiques. De cada una d'aquestes s'ha d'entregar un informe argumentat i discutit adequadament, on es demostrï el domini tant del fonament teòric com de la implementació del procediment.
Críteris d'avaluació	L'estudiant haurà de realitzar 3 pràctiques de resolució d'equacions seguint els guions publicats a Campus Extens o pàgina web. De cada una d'aquestes, n'elaborarà un informe de les tasques desenvolupades i les conclusions i haurà d'incloure un llistat dels programes. Les dates límit per a l'entrega dels informes de pràctiques seran: * LL1: Novembre 2017, 1 informe (data concreta pendent de decidir) * LL2: Gener 2018, 2 informes (data concreta pendent de decidir) La no presentació d'algun informe dins del termini establert suposarà que ja no es podrà fer fins a la fase de recuperació.

Percentatge de la qualificació final: 30% amb qualificació mínima 4

Pràctiques de laboratori IV i V

Modalitat	Classes pràctiques
Tècnica	Informes o memòries de pràctiques (recuperable)
Descripció	Mitjançant l'elaboració d'uns programes (en llenguatge FORTRAN o un altre equivalent) i els corresponents informes, els estudiants hauran de resoldre equacions i dur a terme tasques especificades a un guió. Les pràctiques presencials consten de 4 sessions a les quals els estudiants hauran de resoldre 2 pràctiques. De cada una d'aquestes s'ha d'entregar un informe argumentat i discutit adequadament, on es demostrï el domini tant del fonament teòric com de la implementació del procediment.
Críteris d'avaluació	L'estudiant haurà de realitzar 2 pràctiques de resolució d'equacions seguint els guions publicats a Campus Extens o pàgina web. De cada una d'aquestes, n'elaborarà un informe de les tasques desenvolupades i les conclusions i haurà d'incloure un llistat dels programes. La data límit per a l'entrega dels informes de pràctiques serà: * LL3: Data de l'examen de Febrer 2018, 2 Informes La no presentació d'algun informe dins del termini establert suposarà que ja no es podrà fer fins a la fase de recuperació.

Percentatge de la qualificació final: 20% amb qualificació mínima 4

Resolució de problemes

Modalitat	Tutories ECTS
Tècnica	Altres procediments (no recuperable)
Descripció	En aquestes sessions, els estudiants resoldran problemes teòrics sobre desenvolupaments matemàtics relatius a mètodes numèrics plantejats a les classes de teoria. També es resoldran demostracions numèriques curtes plantejades a les classes teòriques.
Críteris d'avaluació	L'explicació a classe de tutoria dels problemes i tasques assignades a les classes teòriques contarà fins a un 15% de la qualificació final. També es podrà obtenir aquesta part de la qualificació mitjançant la realització i



Any acadèmic	2017-18
Assignatura	21024 - Física Computacional
Grup	Grup 1, IS, GFIS
Guia docent	B
Idioma	Català

lliurament d'una pràctica numèrica addicional proposada pel professor. Pel fet de ser essencialment presencials i voluntàries, aquestes activitats no són recuperables.

Percentatge de la qualificació final: 10%

Examen

Modalitat	Avaluació
Tècnica	Proves objectives (recuperable)
Descripció	Al final del semestre l'alumne haurà de superar un examen on podrà demostrar la seva competència en els mètodes i tècniques de resolució numèrica d'equacions físiques vistes al llarg del curs. L'examen durarà 4 hores. Es fa notar que a meitat del quadrimestre a l'alumne se li oferirà l'opció de realitzar un examen parcial. En cas de treure una nota igual o superior a un 4, això li permetrà eliminar la primera part de la matèria del curs de cara a l'examen global. La nota de l'examen vendria donada per la mitja entre les qualificacions de la primera i segona part.
Criteris d'avaluació	L'examen podrà consistir en preguntes i problemes que requereixen desenvolupaments teòrics o numèrics i en l'elaboració d'un codi o algorisme per a resoldre un problema plantejat.

Percentatge de la qualificació final: 40% amb qualificació mínima 4

Recursos, bibliografia i documentació complementària

El ventall de recursos disponibles que expliquen els continguts de l'assignatura és ample i divers, tant en forma de llibres de referència com de recursos pedagògics i de llibreries de subrutines específiques a internet. Molts textos abarquen temes de mètodes numèrics i física computacional que no són tractats en aquesta assignatura com l'avaluació de funcions i determinació d'arrels, mètodes d'interpolació multidimensional, anàlisi espectral, simulacions de Monte Carlo o algebra matricial.

Donada l'orientació dels continguts cap a la resolució numèrica d'equacions diferencials (ordinàries o en derivades parcials), les activitats de l'assignatura es recolzen en textos específics sobre aquests temes (e.g., Morton i Mayers, 1994; Smith, 1985) però també serà útil conèixer llibres més transversals de física computacional amb capítols concrets dedicats a les EDOs i EDPs (e.g., Koonin, 1989; Pang, 1997).

Bibliografia bàsica

- 1 Morton, K. W., D. F. Mayers, 1994: Numerical solution of partial differential equations: an introduction. Cambridge University Press, 227 pp.
- 2 Smith, G. D., 1985: Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods. 3a reimpr ed. Oxford applied mathematics and computing science series, Clarendon, 337 pp.
- 3 Pang, T., 1997: An introduction to computational physics. Cambridge University Press.

Bibliografia complementària

- 1 Betounes, D., 1997: Partial differential equations with Maple and vector analysis. Telos, 517 pp.
- 2 Koonin, S. E., 1989: Computational physics: FORTRAN version. Addison-Wesley.
- 3 DeVries, P. L., 1999: A first course in computational physics. Wiley.
- 4 Landau, R. H., M. J. Paéz Mejía, and C. C. Bordeianu, 2008: A survey of computational physics :introductory computational science. Princeton University Press, 658 pp.
- 5 Press, W. H., 1992: Numerical recipes in FORTRAN: the art of scientific computing. 2nd ed. Cambridge University Press, 963 pp.





Any acadèmic	2017-18
Assignatura	21024 - Física Computacional
Grup	Grup 1, IS, GFIS
Guia docent	B
Idioma	Català

6 Sewell, G., 1988: The numerical solution of ordinary and partial differential equations. Academic Press, 271 pp.

Altres recursos

L'aula virtual a Campus Extens o pàgina web de l'assignatura inclourà material electrònic (documents i llistats FORTRAN) i enllaços d'interès relacionat amb els temes de l'assignatura.

