

Mètodes informàtics per a físics

2012/2013

Codi: 100146

Crèdits ECTS: 8

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500097 Graduat en Física	776 Graduat en Física	OB	2	2

Professor de contacte

Nom: Carles Navau Ros

Correu electrònic: Carles.Navau@uab.cat

Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: Sí

Algun grup íntegre en espanyol: No

Prerequisits

És recomanable un coneixement previ de càlcul bàsic.

Objectius

- Entendre el concepte de modelització de sistemes físics
- Aprendre a modelitzar sistemes físics en vista a la seva futura resolució numèrica
- Aprendre i saber programar diferents mètodes de resolució numèrica d'algunes de les operacions habituals: equacions, integrals, ...
- Familiaritzar-se amb els conceptes essencials dels mètodes numèrics: precisió, discretització, error numèric, refinament, acondicionament, ...

Competències

- Comunicar eficaçment informació complexa de manera clara i concisa, ja sigui oralment, per escrit o mitjançant TIC, i en presència de públic, tant a públics especialitzats com generals.
- Desenvolupar estratègies d'anàlisi, síntesi i comunicació que li permetin transmetre nocions de física en entorns educatius.
- Usar programari adequat, llenguatges de programació i paquets informàtics en la recerca de problemes físics.

Resultats d'aprenentatge

1. Comunicar eficaçment informació complexa de manera clara i concisa, ja sigui oralment, per escrit o mitjançant TIC, i en presència de públic, tant a públics especialitzats com generals.
2. Desenvolupar estratègies d'anàlisi, síntesi i comunicació que li permetin transmetre nocions de física en entorns educatius.
3. Usar programari adequat, llenguatges de programació i paquets informàtics en la recerca de problemes físics.

Continguts

1. LLENGUATGE C. INTRODUCCIÓ.

1. Conceptes bàsics i introducció a la programació estructurada.
2. Variables, constants, operadors i expressions en C.
3. Seqüències de control. Diagrames de flux. Pseudocodi.
4. Funcions.
5. Matrius.
6. Punters i gestió dinàmica de la memòria
7. Estructures, unions i variables d'ús per l'usuari.
8. Entrada i sortida. Arxius de disc.

2. INTRODUCCIÓ ALS ERRORS

1. Fonts d'error i errors en l'avaluació de funcions.
2. Arrodoniment.

3. RESOLUCIÓ NUMÈRICA D'EQUACIONS NO LINEALS

1. Problema a resoldre.
2. Generalitats sobre els mètodes iteratius.
3. Mètode de Newton-Raphson per una equació.
4. Mètode de Newton-Raphson per sistemes d'equacions.

4. SISTEMES D'EQUACIONS LINEALS

1. Problema a resoldre.
2. Mètodes directes.
3. Mètodes iteratius.
4. Càlcul de valors propis.
5. Inversió de matrius.

5. DERIVACIÓ NUMÈRICA

1. Problema a resoldre
2. Aproximació amb diferències.

6. INTEGRACIÓ NUMÈRICA

1. Problema a resoldre
2. Fórmula del rectangle.
3. Fórmules de Newton-Cotes.
4. Mètode de Romberg.

7. RESOLUCIÓ NUMÈRICA D'EQUACIONS DIFERENCIALS ORDINÀRIES

1. Problema a resoldre
2. Mètode d'Euler. Trajectòria poligonal.
3. Mètodes de Runge-Kutta (RK): RK-2, RK-4.
4. Pas d'integració adaptatiu per RK.
5. Extrapolació de Richardson.

8. MÈTODES DE MONTE CARLO

1. Introducció. Estadística i probabilitats.
2. Generació de nombres aleatoris.
3. Integració de Monte Carlo.
4. Aplicacions.

Metodologia

Anàlisi de resultats i elaboració d'informes de pràctiques . L'alumnat haurà de comprovar, millorar (si cal), i analitzar els resultats obtinguts amb els programes realitzats per poder transmetre'n els principals resultats.

Estarà basat en un guió previ genèric que inclourà els passos principals a seguir en aquest anàlisi.

Estudi personal de la teoria i preparació de les pràctiques Caldrà estudiar, personalment, la teoria i també preparar les pràctiques prèviament (abans d'anar a l'aula d'informàtica). La primera part estarà basada en el repàs dels continguts de la classe de teoria i la seva ampliació amb el material bibliogràfic. La preparació de les pràctiques es farà mitjançant unes qüestions prèvies que l'alumnat haurà de resoldre.

Programació de les simulacions. Caldrà realitzar programes informàtics, amb petits grups.

Lliçons teòriques. Són lliçons dirigides, en les que el professor donarà els punts claus de les diferents parts del contingut així com les línies mestres que caldrà seguir per aprofundir-hi utilitzant la bibliografia. En pretén, en aquesta part, una descripció completa i ordenada de la temàtica de l'assignatura.

Simulacions genèriques (pràctiques demostratives). Es realitzaran un sèrie de simulacions demostratives per mostrar els passos principals que cal seguir en tota simulació. Es pretén que l'alumnat vegi tot el procés necessari per simular un sistema físic.

Pràctiques a l'aula d'informàtica. Activitat supervisada encaminada a aquell alumnat comenci a realitzar diferents pràctiques (simulacions) a partir d'uns guions prèviament repartits i treballats (veure "Estudi personal de la teoria i preparació de les pràctiques"). Les principals dificultats es podran veure ràpidament superades gràcies a la supervisió per part del professorat.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Lliçons teòriques	22	0,88	2, 3
Simulacions genèriques (pràctiques demostratives)	8,5	0,34	1, 2, 3
Tipus: Supervisades			
Pràctiques a l'aula d'informàtica	30	1,2	2, 3
Tipus: Autònomes			
Anàlisi de resultats i elaboració d'informes de pràctiques	65	2,6	1, 2
Estudi personal de la teoria i preparació de les pràctiques	22	0,88	2
Programació de les simulacions.	50	2	2, 3

Avaluació

Part Teòrica.

Es realitzarà un únic examen escrit al final del semestre. La nota mínima per a poder fer mitjana és un 3.00 sobre 10.00.

L'examen constarà de qüestions teòrico-pràctiques relacionades, sobretot, amb els mètodes numèrics vistos a les classes de teoria.

L'examen es farà en la data corresponent al segon parcial.

Part Pràctica.

Les pràctiques s'avaluaran a través de tot el material que entregueu.

Caldrà entregar un informe per pràctica.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Correcció dels treballs de pràctiques (simulacions) entregats	60	0	0	1, 2, 3
Examen escrit (Valoració general del coneixement sobre mètodes numèrics)	40	2,5	0,1	1, 2, 3

Bibliografia

1. Turbo C/C++, manual de referencia, H. Schildt, McGraw Hill
2. Introducción al Análisis Numérico, A. Ralston, Limusa-Wiley.
3. Numerical Recipes, 3rd Edition, W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Cambridge University Press.
4. Análisis numérico. Las matemáticas del cálculo científico, D. Kinkaid, D. Cheney, Wesley Iberoamericana.
5. Mètodes numèrics per a la física, R. Guardiola, E. Higón, J. Ros., Materials 9, Universitat de València.