

Mètodes Numèrics I

Codi: 103950

Crèdits: 3

Titulació	Típus	Curs	Semestre
2500097 Física	OB	2	2

Professor/a de contacte

Nom: José Flix Molina

Correu electrònic: jose.flix@uab.cat

Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest [enllaç](#). Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

Equip docent

Oscar Blanch Bigas

Prerequisits

No hi ha requisits especials en quant a les assignatures de física. Es convenient tenir aprovat el càlcul 1 del primer semestre. És recomanable formar-se previamente amb tècniques de programació en Python (es donaran indicacions i material al llarg del curs). Altres tècniques matemàtiques necessàries són part de la pròpia assignatura.

Objectius

En aquesta assignatura s'introdueixen conceptes bàsics de la teoria de probabilitats i estadística, així com unes nocions fonamentals de programació en Python. La física és en últim terme una ciència experimental, basada en les mesures que es realitzen en experiments científics. Aquestes mesures estan inevitablement subjectes a errors que s'han de quantificar, de vegades en forma de paràmetres amb els seus errors, altres com nivells de confiança, o sobre la base d'altres conceptes. En totes les ciències experimentals es dur a terme un procés semblant i l'eina per a fer-ho de manera rigorosa és la branca de les matemàtiques denominada Estadística. Com a físics hem d'invertir un mínim d'esforç intel·lectual a entendre clarament els conceptes bàsics de l'Estadística. Això és vàlid tant per als físics experimentals que realitzen les mesures, com per als teòrics que tracten d'elaborar models o teories que les expliquin. El llenguatge i els conceptes sobre teoria de probabilitat són també essencials en alguns dels fonaments de la física, en concret en la Mecànica Quàntica i en la Mecànica Estadística. La familiaritat amb aquests conceptes és necessària per a abordar aquestes disciplines. Per a poder afrontar i entendre molts dels conceptes que aprendrem a classe, farem unes sessions pràctiques emprant eines actuals de programació en llenguatges moderns, en particular programació en Python sobre Jupyter Notebooks. Sent conscients de la poca o nul·la experiència en programació, es proporciona material suficient per a poder assolir unes nocions elementals de programació amb antel·lació. Les pràctiques són

ordenades en ordre creixent de dificultat, desde mètodes numèrics molts elementals (integració, derivades), fins a cobrir molts dels aspectes que s'hauran explicat a la part teòrica de la assignatura. Repassarem les estructures de dades bàsiques, així com les estructures de control fonamentals, i emprarem les llibreries de Python d'ús comú en problemes fisico-matemàtics actuals.

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 permetin transmetre els conceptes de la física en entorns educatius i divulgatius
- Introduir canvis en els mètodes i els processos de l'àmbit de coneixement per donar respostes innovadores a les necessitats i demandes de la societat.
- Raonar críticament, tenir capacitat analítica, fer servir correctament el llenguatge tècnic i elaborar arguments lògics
- Utilitzar instruments informàtics (llenguatges de programació i programari) adequats a l'estudi de problemes físics

Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar i descriure amb claredat l'estratègia en abordar un problema determinat des del punt de vista numèric.
2. Analitzar i descriure els problemes físics des d'una perspectiva aproximada modelitzant sistemes físics complexos i solucionant-los aproximadament.
3. Aplicar el mètode de Montecarlo en problemes concrets i resoldre alguns dels problemes més habituals.
4. 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.
5. Controlar, aprofundint en l'anàlisi, els errors comesos en els diferents mètodes numèrics.
6. Desenvolupar estratègies de programació que permetin l'ús col·laboratiu dels programes desenvolupats.
7. Elaborar programes en algun llenguatge de programació particular.
8. Identificar situacions que necessiten un canvi o millora.
9. Presentar resultats numèrics amb precisió, incloent-hi el tractament estadístic d'errors.
10. Raonar críticament, tenir capacitat analítica, usar correctament el llenguatge tècnic i elaborar arguments lògics.

Continguts

Bloc 1. Teoria de la probabilitat.

Capítol 1. Probabilitat i Estadística, conceptes bàsics.

El concepte de probabilitat i la seva interpretació. Les escoles frequentista i bayesiana. Teòria axiomàtica de probabilitat. Distribucions de probabilitat, conceptes de densitat de probabilitat, mitjana, variància i altres moments.

Capítol 2. Probabilitat Condicional. Distribucions de varies variables

Distribucions de varies variables, probabilitat condicional, distribucions marginals. Correlació i covariància. Canvis de variable.

Capítol 3. Distribucions de probabilitat mes freqüents

Distribucions Binomial, Multinomial, Hipergeomètrica, de Poisson, Exponencial, Normal i de Gauss. Propietats de la distribució Gausiana en una i vàries variables. La distribució Chi-2, la distribució t-Student, les distribucions de Cauchy, Gamma i de Landau.

Capítol 4. El mètode de Monte Carlo

Nombres aleatoris. Integració per Monte Carlo, els procediments d'acceptació-rebuig i de transformació de variables.

Bloc 2. Inferència estadística.

Capítol 5. Mostreig d'una població estadística

Els conceptes de mostra i d'estimador. Estimadors de paràmetres d'una població. Exemples elementals.

Capítol 6. El Mètode de Màxima Versemblança

Concepte de versemblança. Variància d'un estimador. La cota de Cramèr-Rao-Fréchet. Estimadors de variància mínima. Aplicacions del mètode.

Capítol 7. Aplicacions d'el Mètode de Màxima Versemblança

Exemples d'aplicació del mètode de Màxima Versemblança. El mètode de Minims Quadrats.

Capítol 8. Contrast d'hipòtesi

Contrast de bondat d'ajustament. Lemma de Neyman-Pearson. Altrest tests. Exemples. Errors Estadístics, Intervalls de Confiança, Límits.

Bloc 3. Programació.

Programació en Python. Ús de Jupyter Notebooks i màquines virtuals a Google (Google Colab). Estructures de control bàsiques en programació.

Ús de les llibreríes de Python emprades amb més freqüència en Data Science.

Sessions pràctiques de mètodes numèrics en ordre creixent de dificultat: Integració numèrica (per MonteCarlo), Mètode de Transformació, Teorema del límit central, Intervalls de confiança, factor de correlació, mètode de màxima versemblança, mètode de Kolmogorov-Smirnov, ...

Metodologia

Classes teòriques amb discussions a classe.

Realització de problemes exemple.

Assignació de problemes i correccions a classe.

Possibilitat de discussió per mitjans electrònics.

Consultes amb els professors de l'assignatura.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
-------	-------	------	--------------------------

Tipus: Dirigides

Classes Pràctiques	12	0,48	4, 6, 7, 9
Classes Teòriques	13	0,52	1, 2, 4, 9
Tipus: Autònomes			
Elaboració de Treballs	21	0,84	1, 4, 6, 7
Estudi Personal	18,5	0,74	1, 2, 4, 6, 7, 9

Avaluació

30% Nota: Avaluació i discussió dels problemes assignats (15% primera part i 15% segona part)

70% Nota: Exàmens Parcial.

L'assistència a les classes pràctiques és obligatòria.

Per fer mitjana de les dues parts de l'assignatura caldrà tenir una nota superior a 3,5 punts a cada parcial. Hi ha examen de recuperació per aquells que no superin l'assignatura per parcials o vulguin pujar nota. A l'examen de recuperació és possible presentar-se únicament si prèviament s'han fet els dos exàmens parcials, i no es tindran en compte les entregues. És a dir, si en la 1a part un té un 10 a les entregues i un 4 a l'examen, té una nota de la primera part de $0.3 \cdot 10 + 0.7 \cdot 4 = 5.8$, sobre 10. A la recuperació per pujar nota es bé a pujar el 5.8, no el 4 que es va treure al parcial. Al final, s'aplica nota mínima de tall per part (3.5) per aprovar l'assignatura.

Avaluació única

L'assistència a les classes pràctiques (de programació) és obligatòria. Al final de cada classe pràctica s'ha de fer una entrega dels resultats per a ser avaluats.

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen que cobrirà tant la primera com la segona part de l'assignatura.

La qualificació de l'estudiant serà la mitjana ponderada de les tres activitats anteriors, on l'examen de la primera part suposarà el 35% de la nota, l'examen de la segona part (programació) el 35% i un 30% els informes/avaluacions de les pràctiques. S'aplica una nota mínima de tall per cadascuna de les parts (3.5) per aprovar l'assignatura, de forma similar als que fan l'avaluació continuada.

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la titulació. Aquí, la part de pràctiques no és recuperable, i la nota final serà la mitja ponderada que obtinguis de la primera i segona part, aplicant també el 3.5 com a tall per part, per a fer mitja.

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Evaluació i discussió de treballs	30	3	0,12	4, 6, 7, 8, 9, 10
Examen Parcial Probabilitat i Estadística	35	2,5	0,1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 10
Examen Parcial Programació	35	2,5	0,1	1, 2, 4, 6, 10
Repesca	100	2,5	0,1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 10

Bibliografia

S. Brandt, "Statistical and Computational Methods in Data Analysis", North-Holland Publishing Co., 3rd printing, 1978 (https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb1839823)

Glen Cowan, "Statistical Data Analysis", Oxford Univ. Press, 1998, ISBN 0198501552 (https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb1675337)

Notes detallades del professor que es posaran disponibles al Campus Virtual.

Programari

Per a la part pràctica, emprarem un ordinador, amb un navegador per accedir a Google Colab i fer les pràctiques en un entorn Python al núvol.