

22-23

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE
SISTEMAS COMPLEJOS

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



MÉTODOS NUMÉRICOS AVANZADOS

CÓDIGO 21156030

UNED

22-23

MÉTODOS NUMÉRICOS AVANZADOS

CÓDIGO 21156030

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

EQUIPO DOCENTE

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

CONTENIDOS

METODOLOGÍA

SISTEMA DE EVALUACIÓN

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Nombre de la asignatura	MÉTODOS NUMÉRICOS AVANZADOS
Código	21156030
Curso académico	2022/2023
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

Los métodos numéricos que se estudian en esta asignatura están orientados a la resolución de problemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden con condiciones de contorno, problemas de autovalores y problemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. La modelización de muchos problemas físicos se realiza mediante una o varias ecuaciones diferenciales acompañadas de condiciones de contorno. Por otra parte, muchas de las ecuaciones fundamentales de la física, como son la ecuación del calor, la ecuación de Schrödinger, la ecuaciones de Maxwell, etc. son ecuaciones en derivadas parciales. En general, no es posible encontrar una solución analítica exacta para estas ecuaciones, por lo que es necesario acudir a los métodos numéricos. Para ver en qué condiciones pueden utilizarse estos métodos y hasta qué punto son precisas las soluciones así obtenidas, hay que entender la base analítica de los mismos. Por ello, el objetivo de la asignatura no es tanto la aplicación mecánica de algoritmos sino el estudio de los propios algoritmos y su adaptación a problemas concretos.

La asignatura Métodos Numéricos Avanzados del máster es una continuación de las asignaturas de Física Computacional que se estudian en el grado en Física. Se presupone que un estudiante de máster estará ya familiarizado con la resolución de ecuaciones no lineales, resolución de sistemas de ecuaciones lineales, análisis de datos, diferenciación e integración numéricas y resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (problemas de condiciones iniciales). En este curso ampliaremos estos conocimientos enfocándonos en el estudio de la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (problemas de condiciones de contorno) y de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Este tipo de ecuaciones es muy abundante en Física e Ingeniería, por lo que resulta de utilidad su aprendizaje no solo en la vertiente académica, sino también como contribución al desarrollo de un perfil profesional específico en el campo de los fluidos, la mecánica, la ingeniería nuclear, etc.

Esta asignatura forma parte del módulo obligatorio del título y por lo tanto es común para todas las especialidades. Es de carácter básico y resulta de utilidad para prácticamente todas las demás asignaturas del plan de estudios. Las técnicas aquí aprendidas, así como la metodología de trabajo, serán de gran ayuda para cursar satisfactoriamente el título.

Aunque la orientación del Máster es principalmente investigadora también se proporciona una formación adecuada a profesionales de distintos sectores productivos que abarcan desde el sector académico hasta el industrial, pasando por empleos de perfil tecnológico e investigador en agencias estatales y empresas privadas.

La ampliación y actualización que propone esta asignatura perteneciente al módulo obligatorio del Máster, permitirá, por una parte, que los estudiantes interesados en hacer el doctorado puedan sentar unas bases más sólidas en Métodos Numéricos y formarse en nuevas líneas de investigación. Por otra parte, posibilitará que un mayor número de estudiantes con aspiraciones académicas o profesionales aprenda los métodos y algoritmos más utilizados en Física Computacional para ser aplicados a otros campos de interés.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

El objetivo de la asignatura es aproximar conjuntos de datos por funciones analíticas u obtener soluciones a problemas que tienen una difícil solución analítica, por lo que es necesario un conocimiento previo de dichos problemas. Desde el punto de vista analítico es necesario conocer la teoría de funciones y su representación gráfica, tener nociones básicas de cálculo diferencial e integral, de cálculo de máximos y mínimos y también conocimiento básico de ecuaciones diferenciales ordinarias. Es importante también tener conocimientos de la física subyacente a los problemas planteados, lo que requiere haber cursado estudios de mecánica clásica, termodinámica, física de fluidos y mecánica estadística. Asimismo es necesario conocer las ideas básicas de la teoría de espacios vectoriales y aplicaciones lineales, matrices y determinantes.

Se presupone que los estudiantes habrán cursado, en la titulación que da acceso al máster, cursos básicos de métodos numéricos o física computacional, por lo que será necesario manejarse con soltura con los conceptos de diferenciación e integración numérica, resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias en problemas de condiciones iniciales (esquemas simples de diferencias finitas y métodos de Runge-Kutta). Será necesario conocer además las técnicas básicas de álgebra matricial (resolución de sistemas de ecuaciones, métodos iterativos, etc.).

Por último, recordamos que esta asignatura es eminentemente práctica y requiere el uso generalizado de herramientas de computación. Aunque hay libertad para trabajar en cualquier lenguaje de programación o software de cálculo simbólico, es imprescindible estar adiestrado en alguno de ellos: C, C++, FORTRAN, python, Mathematica, octave, Maple, etc.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JAIME ARTURO DE LA TORRE RODRIGUEZ
jatorre@fisfun.uned.es
91398-7136
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

ADOLFO VAZQUEZ QUESADA (Coordinador de asignatura)
a.vazquez-quesada@fisfun.uned.es
91398-7143
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

El curso virtual es el instrumento fundamental para la tutorización y seguimiento del aprendizaje. En general, los estudiantes podrán plantear las dudas de contenido en cualquiera de los foros habilitados. No obstante, también es posible realizar consultas al equipo docente a través del correo electrónico, teléfono y presencialmente en los horarios establecidos para estas actividades, solicitando cita previa con suficiente antelación. Los datos de contacto del equipo docente son:

Dr. D. Adolfo Vázquez Quesada (Coordinador de la asignatura)

e-mail: a.vazquez-quesada@fisfun.uned.es

Departamento de Física Fundamental. Despacho 2.00 Biblioteca Central UNED (Senda del Rey 5, 28040 Madrid)

Horario de atención al estudiante: miércoles lectivos, de 10:00 a 14:00

Dr. D. Jaime Arturo de la Torre

e-mail: jatorre@fisfun.uned.es

Tel.: 91 398 71 36

Departamento de Física Fundamental. Despacho 2.01 Biblioteca Central UNED (Senda del Rey 5, 28040 Madrid)

Horario de atención al estudiante: martes lectivos, de 12:00 a 14:00 y de 16:00 a 18:00

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG01 - Adquirir capacidad de análisis y síntesis.

CG02 - Adquirir capacidad de organización y planificación.

CG03 - Adquirir conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio

CG05 - Adquirir capacidad para resolución de problemas

CG08 - Adquirir razonamiento crítico

CG10 - Adquirir capacidad de aprendizaje autónomo

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE02 - Comprender las propiedades cualitativas de las soluciones a las ecuaciones de la física (sus tipos, estabilidad, singularidades, etc.) y su dependencia de los parámetros que definen un sistema físico

CE05 - Capacidad de análisis de problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia

CE06 - Capacidad de formular modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales)

CE07 - Saber construir modelos numéricos para fenómenos descritos por ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales) con diferentes condiciones iniciales o de contorno

CE08 - Capacidad de realizar análisis críticos de resultados experimentales, analíticos y numéricos

CE09 - Capacidad de búsqueda de bibliografía y fuentes de información especializadas. Manejo de las principales bases de datos de bibliografía científica y de patentes

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Conocer los distintos tipos de condiciones de contorno y su significado físico.
2. Conocer los principales métodos iterativos para la resolución de matrices y determinantes, así como el cálculo de valores y vectores propios.
3. Clasificar los diferentes tipos de ecuaciones en derivadas parciales.
4. Entender las propiedades de las curvas características y su significado físico.
5. Estudiar el cálculo con operadores en diferencias y generar esquemas en diferencias finitas.
6. Establecer las condiciones de consistencia, convergencia y estabilidad de los métodos en diferencias.
7. Conocer los esquemas en diferencias más simples y saber aplicarlos a la resolución de las ecuaciones en derivadas parciales más frecuentes en física.
8. Entender la relación entre la formulación en ecuaciones diferenciales y la formulación variacional.
9. Tener un conocimiento básico del método de los elementos finitos.

CONTENIDOS

Tema 1. Problemas de condición de contorno para ecuaciones diferenciales ordinarias

- 1.1 El método del disparo para problemas lineales
- 1.2 El método del disparo para problemas no lineales
- 1.3 Métodos de diferencias finitas para problemas lineales
- 1.4 Métodos de diferencias finitas para problemas no lineales

Tema 2. Problemas de valores característicos

- 2.1 Álgebra lineal y valores característicos
- 2.2 Método iterativo de la potencia
- 2.3 Método QR

Tema 3. Ecuaciones en derivadas parciales elípticas

- 3.1 Introducción. Tipos de ecuaciones en derivadas parciales
- 3.2 La ecuación de Laplace. Método de las diferencias finitas
- 3.3 Métodos de relajación
- 3.4 El método implícito de dirección alternada

Tema 4. Ecuaciones en derivadas parciales parabólicas e hiperbólicas

- 4.1 La ecuación del calor
- 4.2 Método de Crank-Nicolson
- 4.3 Ecuaciones parabólicas en dos y tres dimensiones
- 4.4 Solución del problema de la cuerda en vibración
- 4.5 La ecuación de ondas en dos dimensiones
- 4.6 Método de las características
- 4.7 Convergencia y estabilidad

Tema 5. El método de los elementos finitos

- 5.1 Formulación variacional y formulación débil
- 5.2 El método de Rayleigh-Ritz
- 5.3 Elementos finitos para ecuaciones elípticas
- 5.4 Elementos finitos para ecuaciones parabólicas e hiperbólicas

METODOLOGÍA

El curso se impartirá a través de la plataforma educativa virtual aLF, con la metodología propia de la educación a distancia. El trabajo autónomo del estudiante es esencial para la consecución de los objetivos propuestos en la asignatura. El curso virtual dispondrá de suficientes elementos de ayuda (páginas con información, herramientas para el entrega de tareas, foros de discusión, tablón de noticias, etc.) para ayudar a cumplir los objetivos propuestos.

El desarrollo del curso consiste en la asimilación individual de los contenidos teóricos de cada tema, principalmente haciendo uso de la bibliografía básica y con ayuda del material complementario que se pondrá a disposición de los estudiantes en el curso virtual. Una vez profundizado en los aspectos teóricos del contenido de cada tema, se propondrá a los estudiantes la realización de una tarea o trabajo de desarrollo, en el que tendrán que resolver un problema de física implementando aquellos métodos numéricos que sean relevantes. Se propondrá un ejercicio en el curso virtual y se dispondrá de un tiempo suficientemente amplio para que los estudiantes puedan debatir entre ellos en un foro específico, se alcance una solución numérica al problema planteado haciendo uso de cualquier lenguaje de programación y se elabore una memoria individual del trabajo, donde se encuentre un análisis pormenorizado de lo realizado para obtener las soluciones.

Al respecto de la evaluación, al margen de una obligada obtención de los resultados numéricos esperados, será necesario demostrar la correcta asimilación de los contenidos teóricos. En ese sentido es esencial que los estudiantes elaboren sus propias rutinas de programación, evitando utilizar algoritmos ya implementados en códigos de programación o en programas de cálculo simbólico. Un aspecto relevante será también el análisis de la convergencia de los distintos métodos empleados, así como el estudio de la robustez de los métodos de resolución.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen

No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad

No

Descripción

Durante el curso se propondrán cinco trabajos (uno por tema) para ser realizados de forma individual por los estudiantes. Cada trabajo versará sobre los contenidos teóricos de uno de los temas, y propondrá un problema para ser resuelto haciendo uso de los métodos numéricos conocidos.

Una vez resuelto el problema, será necesario escribir una memoria donde se detalle el planteamiento del problema, el método seguido para la resolución, y un análisis crítico sobre las soluciones obtenidas.

La resolución de cada trabajo requerirá por parte del estudiante la implementación de rutinas y códigos de programación que permitan obtener los resultados esperados. En todos los casos será necesario que el estudiante construya su propias soluciones, sin recurrir a funciones o códigos ya desarrollados en programas de cálculo simbólico.

La memoria se entregará utilizando las herramientas disponibles en el curso virtual. Deberá subirse a la plataforma un documento en formato PDF con una estructura de documento científico, incluyendo necesariamente una introducción, desarrollo teórico del problema, fundamentos de los métodos numéricos a utilizar, implementación, resultados, discusión y conclusiones. Se valorará especialmente la inclusión de esquemas, gráficas y tablas que permitan visualizar los resultados. Además, deberán adjuntarse también los códigos de programación utilizados para realizar el trabajo. Estos códigos deben poderse ejecutar satisfactoriamente y los resultados deben coincidir con los que incluyan en la memoria.

Criterios de evaluación

La valoración de cada trabajo será global, atendiendo entre otros los siguientes conceptos:

Correcto planteamiento del problema físico.

Desarrollo del algoritmo de resolución del problema, detallando cada paso a seguir. Deberá incluirse información general sobre el método de resolución, así como el sistema de ecuaciones o esquema final explícito que origina la solución.

Obtención de resultados correctos.

Comparación de los resultados con soluciones teóricas (si las hubiera).

Análisis crítico de los resultados, incluyendo estudio del orden de convergencia del método empleado, diferencias entre los distintos métodos, etc., soportando la discusión con gráficas, tablas, dependencia con los elementos de discretización, etc.

Código fuente utilizado (que deberá adjuntarse a la memoria).

Presentación.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

Cada trabajo contribuirá con un 20% a la calificación final de la asignatura

Fecha aproximada de entrega

Octubre, noviembre, diciembre, enero, febrero.

Comentarios y observaciones

Será imprescindible cumplir con el calendario de entregas planteado al inicio del curso para poder ser evaluado en la convocatoria ordinaria.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?**Criterios generales**

Cada uno de los 5 trabajos aportará un 20% a la calificación final. Para superar la asignatura será necesario:

Entregar todos los trabajos.

Obtener una calificación mínima de 3 (sobre 10) en cada uno de los trabajos (nota de corte).

Que la suma de todas las calificaciones parciales ponderadas otorgue una calificación mínima de 5 (sobre 10).

Convocatoria ordinaria de febrero

Para ser evaluado en la convocatoria ordinaria de febrero será necesario, además de cumplir los criterios generales, entregar cada trabajo antes de la fecha límite que figure en el curso virtual de la asignatura (aproximadamente una entrega cada mes).

Convocatoria extraordinaria de septiembre

En caso de no cumplir con alguno de los requisitos de la convocatoria ordinaria de febrero, el estudiante podrá ser evaluado en la convocatoria extraordinaria de septiembre. La calificación obtenida en los trabajos entregados durante el cuatrimestre lectivo y que superen la nota de corte se mantendrá para la convocatoria extraordinaria. El estudiante deberá realizar únicamente aquellos trabajos correspondientes a los temas en los que no se hizo la entrega, se entregó fuera de plazo, o que tuvieran una calificación inferior a la nota de corte. Los trabajos evaluables para la convocatoria extraordinaria de septiembre se publicarán una vez finalice el cuatrimestre. Deberán entregarse antes de la fecha límite que figure en el curso virtual (aproximadamente a principios de septiembre).

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9780198596509

Título:NUMERICAL SOLUTION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS : FINITE DIFFERENCE METHODS (3rd ed.)

Autor/es:Smith, David G. ;

Editorial:CLARENDON PRESS

ISBN(13):9786074816631

Título:ANÁLISIS NUMÉRICO (9ª edición)

Autor/es:Burden, Richard L. ; Faires, J. Douglas ;

Editorial:Cengage Learning

ISBN(13):9789684443938

Título:ANÁLISIS NUMÉRICO CON APLICACIONES (6ª)

Autor/es:Gerald, Curtis F. ; Wheatley, Patrick O. ;

Editorial:PEARSON ADDISON-WESLEY

Los principales libros de estudio son:

Richard Burden y J. Douglas Faires, *Análisis Numérico* (9ª edición), Cengage Learning Editores, México, 2012. Alternativamente puede utilizarse cualquiera de las ediciones anteriores a este texto, tanto en su edición en español como en inglés, ya que las diferencias son mínimas (la 10ª edición en inglés es también válida, pero no la 10ª edición en español dado que ha reducido sustancialmente los contenidos). A petición de los estudiantes podrá proporcionarse una tabla de equivalencias entre apartados de una y otra edición.

G. D. Smith, *Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods*, (3ª edición) Ed. Oxford, Clarendon Press, 1992.

Curtis F. Gerald y Patrick O. Wheatley, *Análisis Numérico con Aplicaciones* (Sexta edición), Prentice Hall, Pearson Education, México, 2000. Alternativamente puede utilizarse cualquiera de las ediciones anteriores a este texto.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13):9780471276418

Título:THE FINITE DIFFERENCE METHOD IN PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

Autor/es:Griffiths, D. F. ; Mitchell, Andrew Ronald ;

Editorial:JOHN WILEY AND SONS

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Para realizar los trabajos propuestos es necesario hacer uso de algún programa de cálculo simbólico o lenguaje de programación. Si bien existen soluciones comerciales (como Mathematica o Intel Compiler) es recomendable el uso de software libre o gratuito para el desarrollo de los códigos. Algunas de las librerías más comunes en computación permiten resolver directamente muchos de los problemas planteados. Recordamos que el objetivo de la asignatura no es hacer un uso mecánico de estas librerías, sino desarrollar soluciones propias que, eso sí, pueden compararse con los resultados obtenidos con ellas.

C, C++, FORTRAN

Existen compiladores gratuitos para Linux (gcc), MacOS (Xcode) y Windows (Visual Studio). Algunas librerías como GSL o Armadillo hacen más sencillo el trabajo con álgebra matricial. Librerías como LAPACK resuelven directamente muchos de los problemas planteados en los ejercicios, y pueden usarse para comparar los resultados con respecto a los desarrollos propios.

PYTHON

Es posible usar directamente el compilador de python o alguna de las suites de programación e IDE más usuales como anaconda, spyder o scipy. Librerías como matplotlib, numpy o pandas pueden facilitar también el trabajo de programación.

PROGRAMAS DE CÁLCULO SIMBÓLICO

Existen programas como maxima u octave orientados al cálculo simbólico que pueden resultar menos complejos que la programación de alto nivel. Estos programas (además de los programas de pago Mathematica o Maple) resuelven con diversos comandos la mayor parte de los problemas planteados, por lo que pueden usarse para comparar las soluciones propias desarrolladas por los estudiantes.

REPRESENTACIÓN GRÁFICA

gnuplot es un programa muy versátil para la representación de datos. Python, maxima y octave permiten también la representación usando funciones o librerías auxiliares. En última instancia, pueden usarse programas de ofimática como LibreOffice, OpenOffice, Excel o Numbers.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.