



Asignatura: Cálculo Numérico y Computacional  
Código: 30598  
Centro: Universidad Autónoma de Madrid  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 4

## ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Cálculo Numérico y Computacional / [Computational and Numerical Analysis](#)

### 1.1. Código / **Course number**

30598 / [30598](#)

### 1.2. Materia / **Content area**

Fundamentos de Física de la Materia Condensada / [Condensed Matter Physics Fundaments](#)

### 1.3. Tipo / **Course type**

Formación obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master \(second cycle\)](#)

### 1.5. Curso / **Year**

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.6. Semestre / **Semester**

1<sup>er</sup> Trimestre / [1<sup>st</sup> trimester](#)

### 1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

4 créditos ECTS / [4 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

Es recomendable que el alumno esté familiarizado con conceptos básicos de de Linux y programación, especialmente de Fortran / [Students should be familiar with basic notions of Linux and computational programming, in particual with Fortran.](#)

Disponer de un nivel de inglés que permita al alumno leer bibliografía de consulta / [Students must have a suitable level of English to read references in the language.](#)



Asignatura: Cálculo Numérico y Computacional  
Código: 30598  
Centro: Universidad Autónoma de Madrid  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 4

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia es obligatoria al menos en un 90% / **Attendance at a minimum of 90% of in-class sessions is mandatory**

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente(s) / **Lecturer(s)** Pablo Pou Bell  
Departamento de / **Department of** Física Teórica de la Materia Condensada  
Facultad / **Faculty** Ciencias  
Despacho - Módulo / **Office - Module** 608 - 05  
Teléfono / **Phone:** +34 91 497 2829  
Correo electrónico/**Email:** pablo.pou@uam.es  
Página web/**Website:** www.uam.es/pablo.pou  
Horario de atención al alumnado/**Office hours:** 12h-13h, MXJ

## 1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

Introducir a los alumnos en las técnicas numéricas y computacionales más utilizadas en Física, con énfasis en los algoritmos, así como en la implementación de éstos en el lenguaje de programación FORTRAN.

/

To introduce students in the most used numeric and computational techniques applied in Physics, emphasizing in the algorithms and their implementation in the FORTRAN program language.

## 1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

**I.- Introducción: Herramientas básicas de análisis numérico y programación. (1) Herramientas prácticas (de dominio público):** Linux, Fortran, gnuplot. (2) *Conceptos de Cálculo Numérico:* representación de números, errores, desarrollo de funciones, evaluación de polinomios. (3) *Repaso de Conceptos de Fortran:* tipos, entrada/salida, estructuras de control.

**II.- Interpolación numérica. (1) Conceptos de Cálculo Numérico:** Lagrange, Newton, errores y splines. (2) *Repaso de Conceptos de Fortran:* vectores y matrices, subrutinas.

**III.- Derivación e Integración numérica. (1) Conceptos de Cálculo Numérico:** reglas de trapecio, error, extrapolación: mtdos. de Richardson y Romberg, cuadraturas gaussianas, derivación. (2) *Repaso de Conceptos de Fortran:* subrutinas, funciones, módulos, "Interfaces" implícitas y explícitas, instrucciones USE y EXTERNAL.

**IV.- Aproximación y evaluación de funciones. (1) Conceptos de Cálculo Numérico:** "mejor" aproximación: minimax, error, polinomios de Chebyshev. (2) *Repaso de Conceptos de Fortran:* variables de tipo CHARACTER y funciones intrínsecas para su manejo, transferencia de datos, instrucciones para el manejo de ficheros externos.



Asignatura: Cálculo Numérico y Computacional  
Código: 30598  
Centro: Universidad Autónoma de Madrid  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 4

**V.- Solución numérica de ecuaciones diferenciales.** (1) *Conceptos de Cálculo Numérico*: mtdo. de Euler, mtdos. “predictor-corrector”, mtdo. de Runge-Kutta, mtdos. “multi-step”. (2) *Repaso de Conceptos de Fortran*: números complejos.

**VI.- Minimización de funciones. Optimización.** (1) *Conceptos de Cálculo Numérico*: funciones de una variable, funciones de varias variables: mtdo. Simplex, “steepest descent” y gradientes conjugados, mtdo. BFGS. (2) *Repaso de Conceptos de Fortran*: compilación, “debugging”, Makefiles.

/

**I.- Introduction: Basic tools for Programming and numerical analysis.** (1) Linux, FORTRAN, gnuplot. (2) *Numerical analysis concepts*: number representation, errors, functions, polynomial evaluations. (3) *Fortran*: types, input/output, control structures.

**II.- Numeric interpolation.** (1) *Numerical analysis concepts*: Lagrange, Newton, errors and splines. (2) *Fortran*: vectors and matrices, subroutines.

**III.- Numerical Differentiation and Integration.** (1) *Numerical analysis concepts*: trapezoidal rules, error, extrapolation: Richardson and Romberg methods, Gaussian numerical integration, differentiation. (2) *Fortran*: subroutines, functions, modules, implicit and explicit Interfaces, USE and EXTERNAL.

**IV.- Function approximation and evaluation.** (1) *Numerical analysis concepts*: “best” approach: minimax, error, Chebyshev polynomials. (2) *Fortran*: CHARACTER variables and related intrinsic functions, data transfer, external files.

**V.- Numeric solution of differential equations.** (1) *Numerical analysis concepts*: Euler, “predictor-corrector”, Runge-Kutta and “multi-step” methods. (2) *Fortran*: complex numbers.

**VI.- Optimization.** (1) *Numerical analysis concepts*: Simplex, “steepest descent”, conjugated gradients and BFGS methods. (2) *Fortran*: compilation, “debugging”, Makefiles.

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

1. *Elementary Numerical Analysis*. Kendall Atkinson & Weimin Ha, Ed. Wiley, (2004).
2. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling & Brian P. Flannery, Ed. Cambridge University Press, Cambridge, (2007).
3. *Fortran 95/2003 for scientists and engineers*. S.J. Chapman., Ed. McGraw-Hill, (2008).
4. *Fortran 95/2005 explained*. Michael Metcalf, John Reid & Malcolm Cohen. Ed. Oxford University Press, Oxford, (2004).



Asignatura: Cálculo Numérico y Computacional  
Código: 30598  
Centro: Universidad Autónoma de Madrid  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 4

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

El método docente fundamental es la realización de prácticas de programación. Estas prácticas tendrán relación con la física de la materia condensada. La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria. La evaluación se realizara teniendo en cuenta el trabajo realizado en estas sesiones y la evolución del aprendizaje del alumno. También se impartirán clases teóricas donde se explicarán tanto los algoritmos numéricos como la sintaxis del lenguaje de programación.

/

The principal teaching method is the realization of programming sessions. The practices will regard problems in Condensed Matter Physics. Attendance at practical lectures is mandatory. The evaluation will be realized according to the work carried out in practices. Theoretical lectures will deal with the explanation of the numerical algorithms and the syntaxes of the programming language.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	40 h	40%
	Clases prácticas		
No presencial	Realización de actividades prácticas	60 h	60%
	Estudio semanal (5h x 12 semanas)		
<b>Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 4 ECTS</b>		<b>100 h</b>	

## 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

La asistencia (mínimo 90%) y la realización de los ejercicios son condición necesaria para la superación del curso. Los alumnos deberán presentar los informes del desarrollo de los diferentes ejercicios en un plazo no superior a dos semanas después de la realización de las mismas. La nota final se obtendrá del promedio de las notas de los diferentes informes de los ejercicios prácticos realizados durante el curso / Attendance (minimum of 90%) of in-class sessions and presentation of reports (2 weeks after realization of the corresponding practical exercises) are mandatory. The final qualification will be obtained as the average of the qualifications for those reports presented during the course.



Asignatura: Cálculo Numérico y Computacional  
Código: 30598  
Centro: Universidad Autónoma de Madrid  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 4

El estudiante que no haya asistido a clase ni presentado ninguno de los ejercicios será calificado como “No evaluado” / *The student who had not attended the lectures, nor had presented any work, will be qualified as “Unevaluated”*

La convocatoria extraordinaria seguirá el mismo criterio de evaluación que la ordinaria. / *The same criteria and procedures will be used for the extraordinary evaluation.*

## 5. Cronograma\* / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Tema I	4	5
2	Tema I-Tema II	4	5
3	Tema II	4	5
4	Tema III	4	5
5	Tema III-Tema IV	4	5
6	Tema IV	4	5
7	Tema IV-Tema V	4	5
8	Tema V	4	5
9	Tema VI	4	5
10	Tema VI	4	5
11	Actividades prácticas		5
12	Actividades prácticas		5