



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2023/2024

Nº de proyecto 356

Colab en el aula

Responsable del Proyecto: Jaime Rosado Vélez

Facultad de Ciencias Físicas

Departamento de Estructura de la Materia,
Física Térmica y Electrónica

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

La computación científica es imprescindible en la física moderna. Muy especialmente en los ámbitos de la Física Cuántica y de la Radiofísica, la resolución de cualquier problema realista requiere cálculos numéricos o simulaciones de Monte Carlo. Es por eso por lo que se da cada vez más importancia a la programación y a los métodos de computación en las titulaciones de la UCM relacionadas con estos ámbitos de conocimiento.

El presente proyecto de innovación docente es una continuación de un proyecto previo del curso académico 2022/23, donde se crearon herramientas de computación en Python y Google Colab para su uso docente en varias asignaturas del Grado en Física y del Máster en Física Biomédica. Para este curso académico, se propuso mejorar y ampliar estas herramientas, así como crear otras nuevas para extender la aplicación del proyecto a un mayor número de asignaturas.

Se elige Google Colab porque es un entorno multiplataforma que no requiere instalación y que hace un uso óptimo de los servicios de Google para la UCM. Además, está completamente integrado con el lenguaje de programación Python, que es ampliamente utilizado en el ámbito científico. Familiarizar a los estudiantes con este tipo de herramientas es además un complemento formativo de gran utilidad.

Los objetivos particulares del proyecto fueron los siguientes.

- *Creación de herramientas de cálculo y visualización de ejemplos prácticos en las asignaturas de Física Cuántica I y II del Grado en Física*

Estas asignaturas no estaban incluidas en el proyecto previo del curso 2022/23. En el presente proyecto se propuso crear nuevas herramientas para hacer ejemplos de clase y complementos de formación en estas dos asignaturas con algunos de los siguientes propósitos:

- Obtener y visualizar las soluciones a la ecuación de Schrödinger para pozos unidimensionales típicos (pozo infinito, cuadrado, oscilador armónico, etc).
- Resolver problemas de transmisión y reflexión en barreras de potencial de distintas características.
- Generar vídeos cortos que ilustren la evolución temporal de estados de superposición o la dependencia temporal de la probabilidad de transición (oscilaciones de Rabi).
- Preparar ejemplos gráficos para mostrar algunos conceptos teóricos abstractos, como el efecto de la simetría o antisimetría de la función de onda sobre la distribución espacial de probabilidad de partículas idénticas en un sistema cuántico.

- *Extensión y mejora de herramientas de cálculo para Estructura de la Materia y Física Atómica y Molecular del Grado en Física*

En el curso 2022/23 se actualizaron los programas de las prácticas de cálculo numérico que se realizan en Física Atómica y Molecular y se empezó a desarrollar una librería de herramientas para la construcción y visualización de orbitales atómicos, llamada *atomictools*. Para el curso 2023/24, se propuso seguir mejorando y ampliando estas herramientas. En particular, se propuso incorporar la creación y visualización de orbitales moleculares y el cálculo de elementos de matriz de operadores cuánticos de un electrón en la librería *atomictools*. El objetivo es crear nuevos ejercicios de clase y entregables basados en estas herramientas para ambas asignaturas.

Hay que señalar que muchos estudiantes del Grado en Física que cursan Estructura de la Materia en tercero cursan también Física Atómica y Molecular en cuarto, de manera que tienen la posibilidad de sacar el máximo partido a esta librería de herramientas.

- *Extensión y mejora de una simulación Monte Carlo para su uso docente en las asignaturas Interacción Radiación-Materia, Radiofísica y Física de la Radioterapia del Grado en Física y del Máster en Física Biomédica*

Durante el curso 2022/23 se desarrolló un código en Python, llamado *LegPy*, para la simulación de rayos gamma y electrones en medios materiales. Se prepararon ejercicios entregables basados en esta simulación para las tres asignaturas. Para el curso 2023/24, se propuso seguir desarrollando este código. Por un lado, se planteó implementar nuevas funcionalidades para estudiar distintos tipos de detectores de radiación y comparar con resultados obtenidos en las prácticas de laboratorio de Interacción Radiación-Materia. Por otro lado, se planteó trabajar en casos de interés para las asignaturas de Radiofísica y de Física de la Radioterapia, los cuales son también de utilidad para la formación de radiofísicos hospitalarios.

2. Objetivos alcanzados

Todos los objetivos propuestos se han llevado a cabo durante la ejecución del proyecto. A continuación, se describe el grado de cumplimiento de cada objetivo específico.

- *Creación de herramientas de cálculo y visualización de ejemplos prácticos en las asignaturas de Física Cuántica I y II del Grado en Física*

Se ha trabajado en el desarrollo de estas herramientas para estas dos asignaturas. En particular, se han creado aplicaciones para la visualización de las soluciones a la ecuación de Schrödinger para pozos cuadrados y para un oscilador armónico, así como para la resolución de problemas de transmisión y reflexión en barreras de potencial. También se crearon versiones preliminares de aplicaciones para la visualización de la evolución temporal de estados de superposición.

Estas herramientas no se han podido utilizar para la docencia de estas dos asignaturas durante este curso académico por falta de tiempo. Pero está previsto poder usarlas en los próximos cursos. Por otro lado, en la asignatura de Estructura de la Materia, sí se ha podido usar la aplicación de visualización de la evolución temporal de las soluciones del oscilador armónico (ver Fig. 1) para ilustrar el comportamiento de los estados vibracionales moleculares.

- *Extensión y mejora de herramientas de cálculo para Estructura de la Materia y Física Atómica y Molecular del Grado en Física*

Según lo previsto, se ha seguido desarrollando la librería *atomictools* para la creación y visualización de orbitales (ver Fig. 2). En concreto, se ha implementado el cálculo y visualización de orbitales moleculares por el método CLOA (Combinación Lineal de Orbitales Atómicos) y el cálculo de elementos de matriz de operadores de un solo electrón. Además, el código se ha documentado profusamente para que el usuario reciba información sobre funciones y clases en la ayuda contextual.

Por otro lado, se ha hecho una nueva actualización de los programas de prácticas de cálculo de la asignatura Física Atómica y Molecular, integrando dichos programas dentro de la librería *atomictools*. Los nuevos programas se ejecutan desde un cuaderno de Colab, el cual también

hace uso de otras herramientas de *atomictools* para cálculos auxiliares que complementan dichas prácticas.

La librería *atomictools* se ha usado durante este curso para la visualización de ejemplos y resolución de ejercicios en ambas asignaturas. Se ha podido usar la nueva funcionalidad para la visualización de orbitales moleculares (ver Fig. 3). El resto de funcionalidades que se han incorporado en la librería durante la ejecución de este proyecto, incluidos los nuevos programas para las prácticas de cálculo de Física Atómica y Molecular, se usarán en los próximos cursos.

- *Extensión y mejora de una simulación Monte Carlo para su uso docente en las asignaturas Interacción Radiación-Materia, Radiofísica y Física de la Radioterapia del Grado en Física y el Máster en Física Biomédica*

Este código de Monte Carlo, llamado *LegPy*, está plenamente operativo desde finales del curso 2022/23 y se ha usado en estas tres asignaturas durante este curso 2023/24 para la realización de ejemplos de clase y ejercicios entregables. Este código ha demostrado ser una herramienta muy útil a la vez que sencilla de usar en múltiples aplicaciones, no sólo en el ámbito docente, y ha dado lugar a una publicación en una revista científica (ver Fig. 4).

Durante la ejecución de este proyecto, se ha implementado en *LegPy* la emisión y propagación de rayos X, se ha incrementado significativamente el número de medios materiales disponibles, se ha revisado la sintaxis de clases y funciones para mejorar la interfaz del usuario, y se han incluido algunas nuevas funciones de utilidad para la creación de ejemplos de interés en radiodiagnóstico y radioterapia. También se ha trabajado en la documentación del código, incluyendo un tutorial con ejemplos de uso.

3. Metodología empleada en el proyecto

El proyecto se desarrolló en tres grupos de trabajo, uno para cada objetivo descrito en las secciones anteriores.

- *Creación de herramientas de cálculo y visualización de ejemplos prácticos en las asignaturas de Física Cuántica I y II del Grado en Física (Marcos López y Óscar Moreno)*

Estas herramientas se desarrollaron en Python, a partir de las cuales se crearon clips de vídeo de corta duración para ilustrar algunos casos de estudio: oscilaciones de las partes real e imaginaria de las soluciones a la ecuación de Schrödinger para distintos pozos de potencial, problemas de transmisión y reflexión de la función de onda en barreras de potencial, y evolución temporal de estados de superposición.

Actualmente se está elaborando una librería con estas herramientas para hacerlas disponibles en un repositorio público de GitHub. También se ha empezado a preparar un conjunto de apuntes que incluyen estos vídeos interactivos, lo cual será objeto de otro proyecto de innovación docente futuro.

- *Extensión y mejora de herramientas de cálculo para Estructura de la Materia y Física Atómica y Molecular del Grado en Física (Alejandro Villar, Iris Madrigal, Marcos López, Óscar Moreno y Jaime Rosado)*

La librería *atomictools* está escrita en Python y se está desarrollando en un repositorio público de GitHub de manera colaborativa. La extensión de la librería para incluir orbitales moleculares

fue llevada a cabo por Alejandro Villar y Jaime Rosado. Iris Madrigal se encargó de documentar el código y desarrolló la parte del cálculo de elementos de matriz de operadores de un electrón como parte de su Trabajo Fin de Grado (TFG), bajo la supervisión de Jaime Rosado. La actualización e integración en *atomictools* de los programas de las prácticas de cálculo de Física Atómica y Molecular la realizó Jaime Rosado.

Óscar Moreno, Marcos López y Jaime Rosado actualizaron y usaron los cuadernos Colab para ejemplos de clase y las prácticas de cálculo y realizaron encuestas de opinión de los estudiantes a través del Campus Virtual de ambas asignaturas.

- *Extensión y mejora de una simulación Monte Carlo para su uso docente en las asignaturas Interacción Radiación-Materia, Radiofísica y Física de la Radioterapia del Grado en Física y el Máster en Física Biomédica (Fernando Arqueros, Víctor Moya, Jaime Rosado, David Sevillano y César Rodríguez)*

El código de simulación *LegPy* está escrito en Python y también se está desarrollado de manera colaborativa en un repositorio público de GitHub. Fernando Arqueros, Víctor Moya y Jaime Rosado fueron los responsables de incluir la simulación de rayos X, hacer las diversas mejoras del código, mantener y documentar el repositorio público, y difundir los resultados.

Fernando Arqueros, David Sevillano y César Rodríguez crearon y actualizaron cuadernos Colab con nuevos ejemplos de clase y ejercicios entregables para las asignaturas mencionadas. También se encargaron de realizar encuestas de opinión de los estudiantes a través del Campus Virtual de estas asignaturas.

4. Recursos humanos

A continuación, se hace una breve reseña de los miembros del equipo de trabajo:

- Marcos López es Profesor Titular y participa en la docencia de diversas materias relacionadas con este proyecto: Interacción Radiación-Materia, Estructura de la Materia y Física Cuántica II. Es experto en análisis de datos, desarrollo de software científico y simulaciones Monte Carlo en el campo de la Física de Astropartículas.
- Óscar Moreno es Profesor Titular y participa en la docencia de Física Cuántica II y Estructura de la Materia. También participa en otras asignaturas en el área de la Física Atómica, Molecular y Nuclear. Es experto en el desarrollo de simulaciones de Monte Carlo y modelado matemático en el campo de la Física Nuclear y el Modelo Electrodébil.
- Fernando Arqueros es Catedrático de Universidad Emérito y tiene una dilatada experiencia docente en las asignaturas Interacción Radiación-Materia y Radiofísica. También ha impartido otras materias en el área de la Física Atómica, Molecular y Nuclear. Es experto en análisis de datos y simulaciones de Monte Carlo en los campos de la Física de Astropartículas y de Radiofísica.
- Jaime Rosado es Profesor Titular y tiene amplia experiencia en las asignaturas Física Atómica y Molecular, Estructura de la Materia e Interacción Radiación-Materia. Es experto en el desarrollo de simulaciones de Monte Carlo y modelado matemático en los campos de la Física de Astropartículas, Física Atómica y Fotosensores.
- David Sevillano es Profesor Asociado y Radiofísico Hospitalario en el Servicio de Radiofísica del Hospital Universitario Ramón y Cajal. Participa como docente en la asignatura Física de la Radioterapia del Máster de Física Biomédica.

- César Rodríguez es Profesor Asociado y Radiofísico Hospitalario en el Servicio de Radiofísica del Hospital Universitario de Fuenlabrada. Participa como docente en la asignatura Física de la Radioterapia del Máster de Física Biomédica.
- Víctor Moya es graduado en Física y está realizando una tesis doctoral sobre la caracterización y modelado de detectores en el ámbito de la Física de Astropartículas y la Física Médica. Tiene experiencia en la simulación de la interacción de la radiación con la materia y en la preparación de las prácticas docentes de algunas de las asignaturas relacionadas con este proyecto.
- Alejandro Villar terminó el Grado en Física en el curso académico 2022/23, en el que realizó un TFG para el desarrollo de la librería *atomictools*. Ha seguido participando en este proyecto durante este curso académico. Tiene experiencia en programación.
- Iris Madrigal terminará el Grado en Física ha realizado un TFG en el curso académico 2023/24 para el desarrollo de la librería *atomictools* y terminará el Grado en Física en este mismo curso. Tiene experiencia en programación.

5. Desarrollo de las actividades

A continuación, se describen las actividades desarrolladas en el proyecto, aportando datos sobre la difusión de resultados.

- *Julio-septiembre de 2023. Implementación de los orbitales moleculares en la librería atomictools*

Se implementó esta nueva funcionalidad en la librería y se actualizaron los cuadernos Colab para Estructura de la Materia y Física Atómica y Molecular con ejemplos sobre moléculas. Los cambios se incorporaron en el siguiente repositorio público:

<https://github.com/JaimeRosado/atomictools>

- *Octubre de 2023. Publicación de un artículo científico sobre el código LegPy*

Se publicó un artículo científico de acceso abierto en la revista Radiation Measurements para describir los algoritmos de Monte Carlo implementados en *LegPy* y la comparación de los resultados de simulaciones con datos experimentales y de otras simulaciones de referencia. El artículo está disponible en el siguiente enlace:

<https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2023.107029>

- *Septiembre-diciembre de 2023. Desarrollo de herramientas para Física Cuántica I y II*

Las herramientas descritas en el primer objetivo del proyecto se desarrollaron básicamente en el primer cuatrimestre del curso. Se compartieron y explicaron estas herramientas entre profesores de varias asignaturas, incluida Estructura de la Materia, del segundo cuatrimestre.

- *Septiembre-diciembre de 2023. Uso de LegPy en Interacción Radiación-Materia y Radiofísica*

Se realizaron cuadernos de Colab con nuevos ejemplos de clase y ejercicios entregables usando esta herramienta de simulación.

Al finalizar el curso, se facilitó a los estudiantes un cuestionario de valoración con las siguientes preguntas:

- Valora la utilidad de los cuadernos para la asimilación de conceptos de la asignatura
- Valora la facilidad de uso de los cuadernos
- Valora los ejemplos/ejercicios planteados en los cuadernos
- Añade un comentario

Las puntuaciones medias fueron entre 3.4 y 4.5 sobre 5, y los estudiantes pusieron comentarios muy positivos. Se concluyó que los ejercicios resultaron ser muy útiles y ayudaron a la asimilación de conceptos, aunque algunos estudiantes tuvieron dificultades para manejarse con código en Python y los problemas propuestos.

- *Septiembre-diciembre de 2023. Uso de atomictools y cuadernos Colab en Física Atómica y Molecular*

Se crearon cuadernos Colab con ejemplos prácticos para ilustrar conceptos abstractos de la teoría usando la librería *atomictools*, así como para resolver de manera gráfica algunos ejercicios de clase.

Al finalizar el curso, se facilitó a los estudiantes un cuestionario de valoración con las mismas preguntas que en el punto anterior. Las puntuaciones medias fueron entre 3.5 y 4.2 sobre 5, y los estudiantes pusieron, en general, comentarios muy positivos. Se advierte que en esta asignatura estas herramientas tienen una función más ilustrativa y de repaso de conceptos vistos en Estructura de la Materia, que es del curso anterior. Los estudiantes valoraron mejor las herramientas para la resolución de ejercicios.

- *Enero-junio de 2024. TFG de Iris Madrigal sobre la implementación de nuevas funcionalidades de atomictools*

La estudiante se encargó de la documentación del código y la implementación del cálculo de elementos de matriz de operadores de un solo electrón. Todos los cambios se incorporaron en el repositorio público de *atomictools*:

<https://github.com/JaimeRosado/atomictools>

La estudiante defenderá próximamente su TFG.

- *Abril-junio de 2024. Mejoras en LegPy*

Durante estos meses se realizaron las diversas mejoras de este código de simulación descritas en el tercer objetivo del proyecto. A destacar, la implementación de la emisión de rayos X y la inclusión de un gran número de medios materiales. Todos los cambios se incorporaron en el repositorio público de LegPy:

<https://github.com/JaimeRosado/LegPy>

Está previsto hacer una nueva publicación para explicar los cambios realizados.

- *Febrero-mayo de 2024. Elaboración de cuadernos Colab con ejercicios para Física del Radiodiagnóstico*

Se mejoraron los ejercicios que ya se habían propuesto el curso anterior y se añadieron nuevos ejemplos de clase, aprovechando las nuevas funcionalidades que se han incorporado al código. Al finalizar el curso, se facilitó a los estudiantes un cuestionario de valoración con las mismas preguntas que en otras asignaturas antes comentadas. Desafortunadamente, por el momento en que se realizó la encuesta, hubo una participación muy baja (<5 estudiantes). Las puntuaciones medias en el cuestionario fueron en torno a 3 sobre 5.

- *Febrero-mayo de 2024. Mejora y utilización de *atomictools* y cuadernos Colab para Estructura de la Materia*

Se adaptaron cuadernos Colab con ejemplos prácticos para ilustrar conceptos abstractos de la teoría usando las mejoras realizadas en la librería *atomictools*.

Al finalizar el curso, se facilitó a los estudiantes un cuestionario de valoración con las mismas preguntas que en otras asignaturas. Las puntuaciones medias fueron entre 4.1 y 4.8 sobre 5, con comentarios muy positivos por parte de los estudiantes, que les resultaron muy útiles estas herramientas para asimilar conceptos de la asignatura. Se observa que estas herramientas son mucho más útiles en esta asignatura, donde se ven conceptos básicos, en comparación con Física Atómica y Molecular, donde estos conceptos se dan por conocidos.

- *Mayo-junio de 2024. Mejora e integración de las prácticas de cálculo numérico de Física Atómica y Molecular*

Se reescribieron los programas de cálculo numérico de esta asignatura para integrarlos en la librería *atomictools*. Además, se incorporaron algunos cálculos ilustrativos en estas prácticas que hacen uso de las nuevas funcionalidades implementadas en *atomictools*, principalmente el cálculo de elementos de matriz de operadores de un electrón. Estos nuevos programas se usarán en el próximo curso, haciendo además un uso más exhaustivo de ellos para la resolución de ejercicios de clase. Los cambios realizados se incorporaron en el repositorio público de *atomictools*:

<https://github.com/JaimeRosado/atomictools>

6. Anexos

En esta sección se recogen las figuras que ilustran las herramientas desarrolladas en el proyecto.

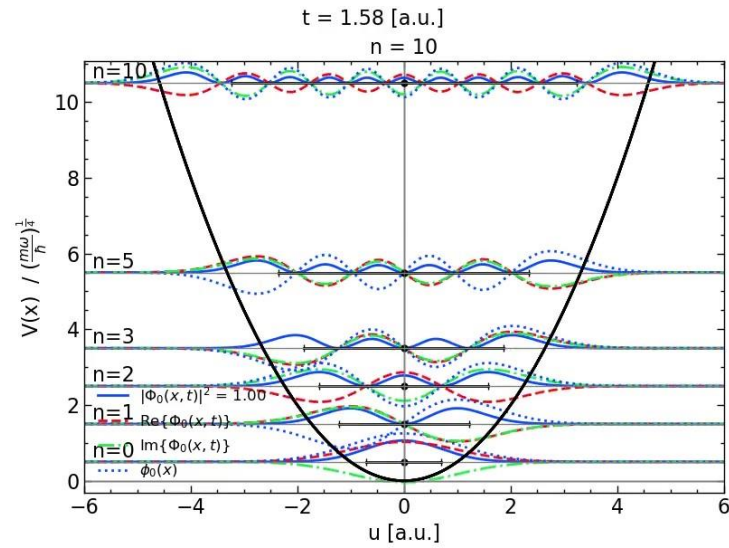


Fig. 1. Fotograma de clip de vídeo donde se muestran las soluciones de un pozo armónico unidimensional y la evolución temporal de las partes real e imaginaria de cada función.

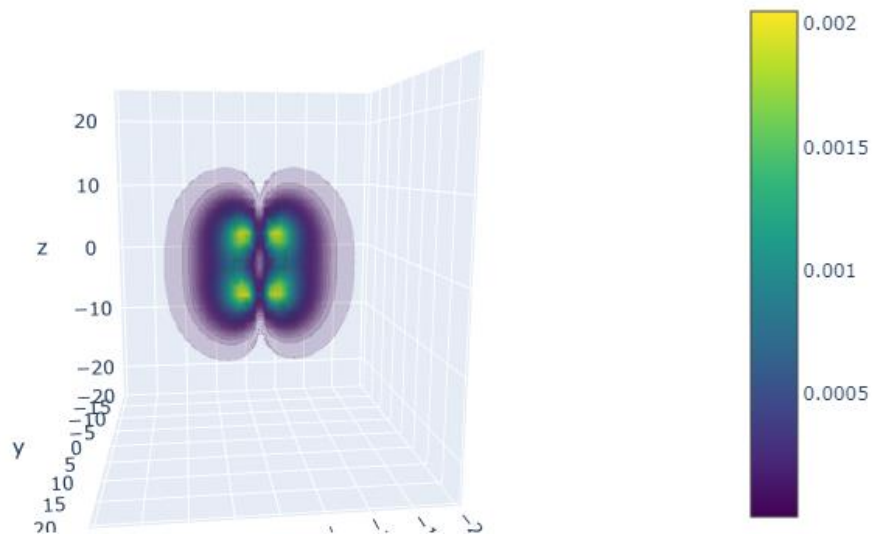


Fig. 2. Visualización de un orbital molecular de tipo π enlazante mediante la librería *atomictools*.

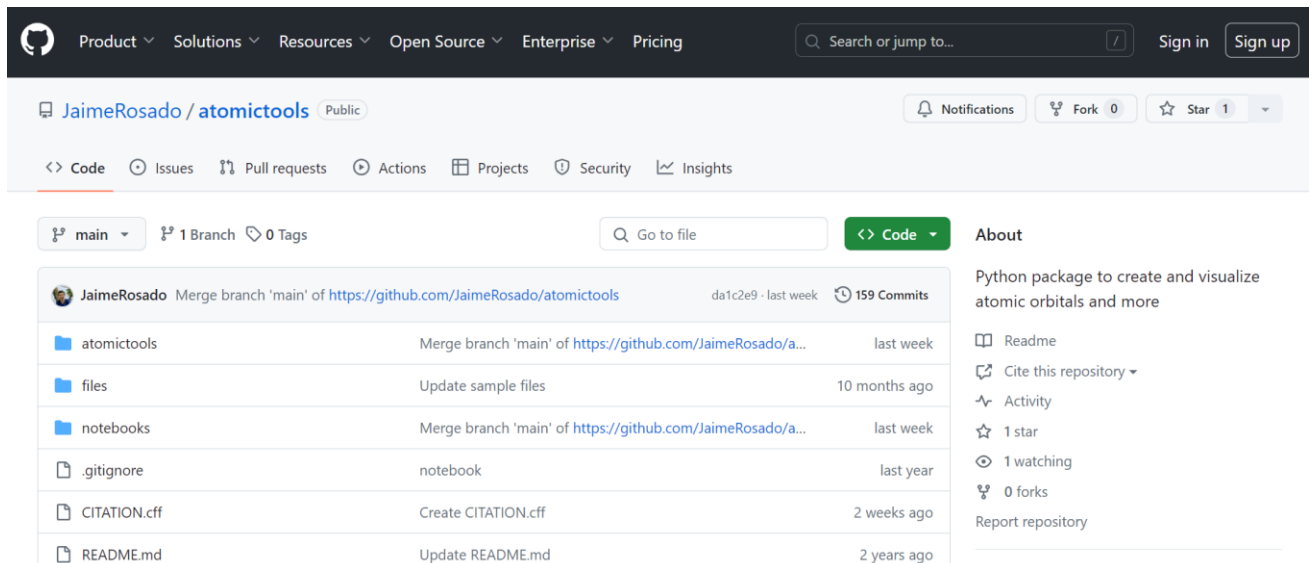


Fig. 3. Captura de pantalla del repositorio público donde se ha subido la librería *atomictools* desarrollada en este proyecto.

```
import LegPy as lpy

# Cylinder 0.4 cm in diameter and 0.4 cm in length. 40x40x40 voxels in Cartesian coordinates
geometry = lpy.Geometry(name='cylinder', diam=0.4, z=0.4, z_ch=0.3, n_x=40, n_y=40, n_z=40)
# Water: 0 cm < z < 0.3 cm; Pb: 0.3 cm < z < 0.4 cm
medium1 = lpy.Medium(name='water')
medium2 = lpy.Medium(name='Pb')

# Parallel electron beam with circular cross section of 0.1 cm in diameter
beam = lpy.Beam(particle='electron', name='parallel', diam=0.1)
# Exponential energy spectrum from 0.1 MeV to 2 MeV with decay rate of 1 MeV
spectrum = lpy.Spectrum(name='exponential', E_min=0.1, E_max=2., E_ch=1.)

# Simulation performed for 500000 electrons
result = lpy.MC([medium1, medium2], geometry, spectrum, beam, n_part=500000)
```

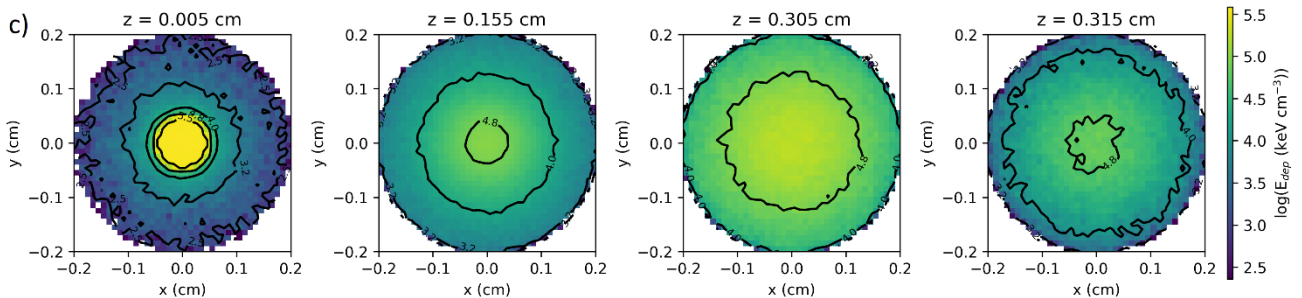
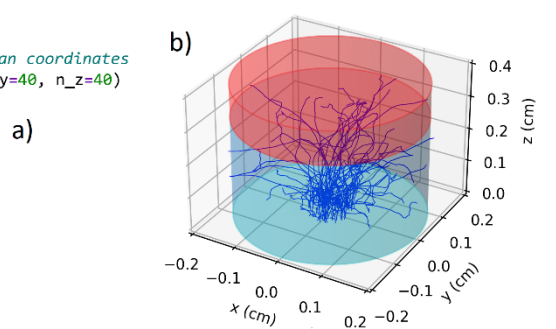


Fig. 3. Ejemplo de ejecución del código LegPy. Tomado de V. Moya, J. Rosado, F. Arqueros; Rad. Meas. 169 (2023) 107029.