

Métodos Computacionales y Laboratorio

Germán Chaparro
Departamento de Física
Universidad de los Andes, Bogotá
2016-1

Temas

- Presentación
- Reglas del Juego
- Ejemplos

Profesor: **Germán Chaparro**

Correo: g.chaparro@uniandes.edu.co

Computación Científica

Computación en *clusters* o supercomputadores con 10^5 - 10^6 *cores*

El más más:

Tianhe-2 (Vía Láctea-2)

> 30 Petaflops

> 3 millones de cores

Guangzhou, CHN

<http://top500.org>



El Curso

- Computación Científica
- Carpintería de Software
- Vamos a familiarizarnos con UNIX, lenguajes como Python, FORTRAN, C.

Carpintería de Software

- Control de Versión (Git, svn, Mercurial)
- Makefiles
- *Scripts* en Python, en el *shell* de UNIX
- *Debugging, testing*
- Documentación (Markdown, Sphinx)
- Reproducibilidad, Estabilidad, Legibilidad

Reglas del Juego

- Cero Plagio
- Entregas individuales
- Revisión bibliográfica previa a cada clase
- Bonificaciones por trabajo en Laboratorio

Clase Magistral

- 2 sesiones semanales, con trabajo *hands-on*
- Se espera que ustedes lean las notas, vean los tutoriales o los capítulos de libro recomendados antes de cada sesión
- 7 ejercicios prácticos (entregas)

Laboratorio

- 1 sesión práctica semanal
- Reforzaremos lo visto en la Clase Magistral
- 7 talleres prácticos

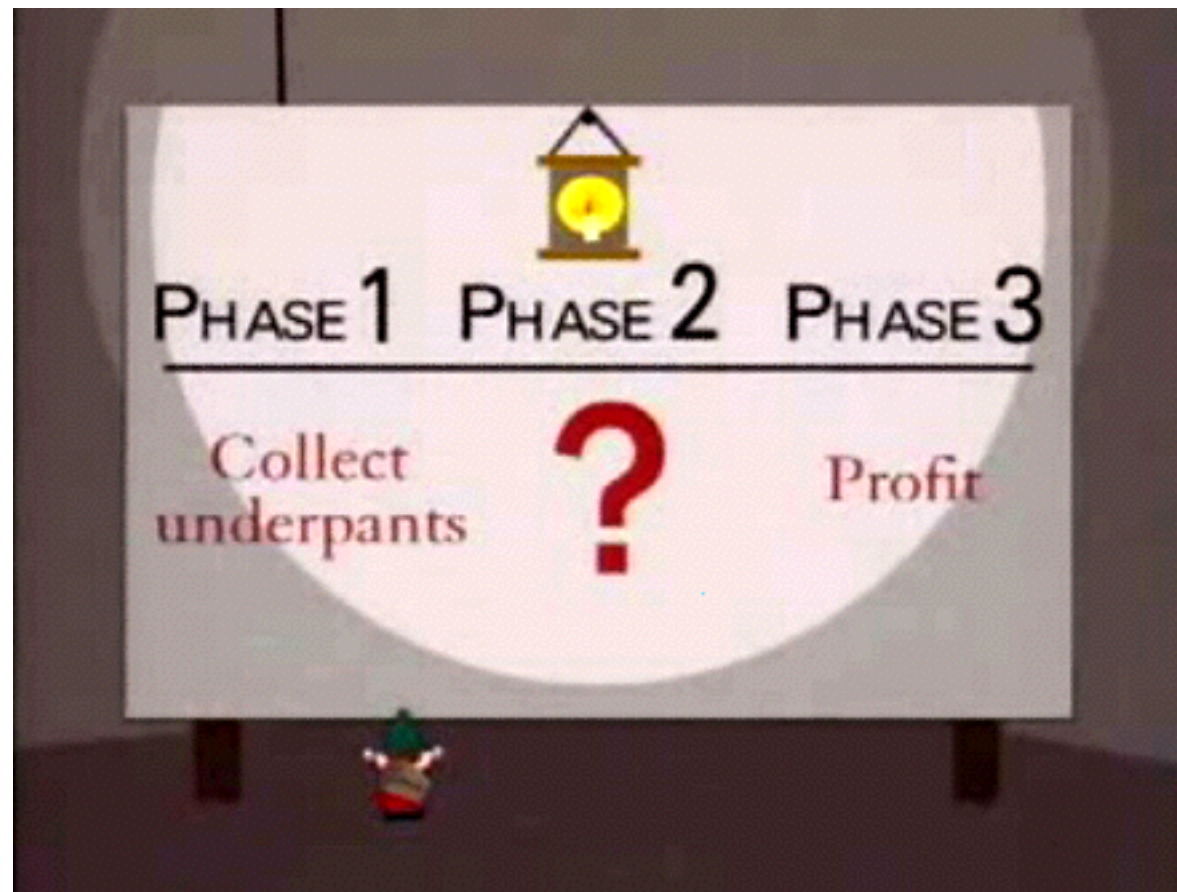
Requisitos

- Algo de experiencia programando
 - Editar y ejecutar un programa
 - Usar estructuras lógicas
 - Escribir funciones o subrutinas
- Conocimientos en Álgebra Lineal y Cálculo
- Capacidad de aprender cosas nuevas sobre la marcha (de ahora en adelante)

Equipos

- En clase: Máquina Virtual
- En sus casas: Máquina Virtual o compu con Linux/OSX
- En cada clase haremos una revisión del software nuevo

Algoritmos

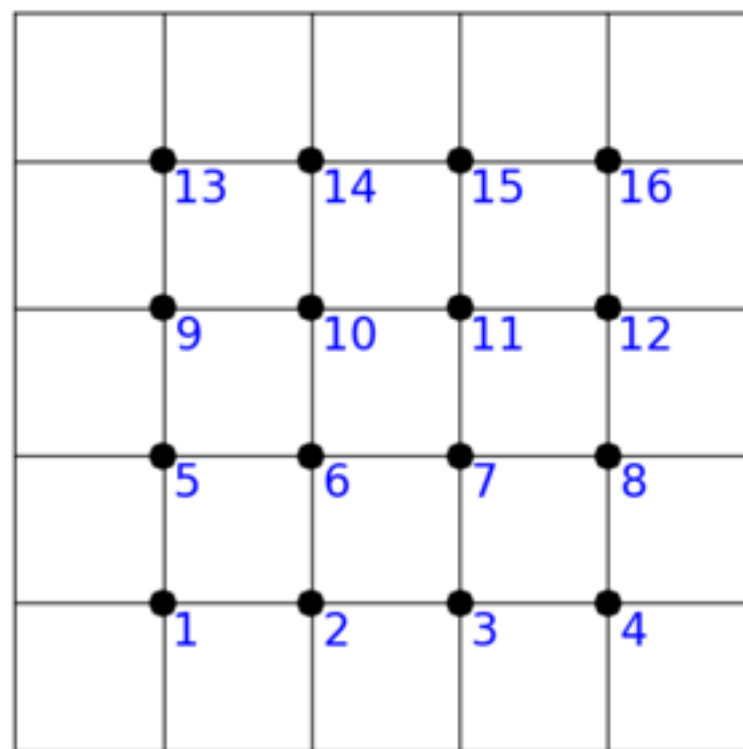


Algoritmos

¿Cómo hacer un arroz?

Ejemplo: **Problema de Conducción Térmica (Estado Estacionario)**

- Vamos a discretizar un sistema 2D en donde hay conducción térmica.



- Modelo: *grid* (grilla, rejilla) de tamaño $N \times N$, en donde la temperatura en los N^2 puntos se puede calcular.

Ejemplo: **Problema de Conducción Térmica (Estado Estacionario)**

- Condiciones de Frontera
- Solución de estado estacionario (*steady state*)
- Modelo matemático (4 vecinos)

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1})$$

Ejemplo: **Problema de Conducción Térmica (Estado Estacionario)**

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1})$$

Sistema de N^2 ecuaciones con N^2 incógnitas.

Hay que solucionar la ecuación matricial **Au=B**

La matriz **A** tiene dimensiones $N^2 \times N^2$

Es una matriz dispersa, o rala

Evolución en la manera de solucionar este tipo de problemas

