

MÉTODOS COMPUTACIONALES

Jaime E. Forero Romero

NOMBRE DEL CURSO: Métodos Computacionales
CÓDIGO DEL CURSO: FISI 2028 (Magistral) FISI 2809 (Laboratorio)
UNIDAD ACADÉMICA: Departamento de Física
PERIODO ACADÉMICO: 201620
HORARIO (MAGISTRAL): Mi 12:30 a 13:50 y Vi, 15:30 a 16:50
HORARIO (LABORATORIO): Ju 6:30 - 7:50

NOMBRE PROFESOR(A) PRINCIPAL: Jaime E. Forero Romero
CORREO ELECTRÓNICO: je.forero@uniandes.edu.co
HORARIO Y LUGAR DE ATENCIÓN: Mi 14:00 a 16:00, Oficina Ip208

NOMBRE PROFESOR(A) COMPLEMENTARIO(A): Luis Alberto Gutierrez
CORREO ELECTRÓNICO: la.gutierrez1280@uniandes.edu.co

I Introducción

Los métodos computacionales son un aspecto inseparable de cualquier área de trabajo en ciencia e ingeniería. Esto se debe en gran parte a la disminución en costos y complejidad de uso de las computadoras programables, unido al aumento exponencial en su capacidad de procesamiento. Este curso busca guiar a los estudiantes en el desarrollo de sus *habilidades computacionales* en generar y procesar datos para obtener información sobre la realidad que esos datos pretenden describir. Estos datos pueden ser mediciones o simulaciones de sistemas físicos, químicos, geológicos, biológicos, financieros o industriales, entre otros. El programa del curso tiene dos componentes diferenciadas: métodos numéricos y *carpintería* de software. La parte de métodos numéricos busca ilustrar el paso entre la formulación de una pregunta sobre la realidad en términos matemáticos y su descripción numérica/computacional, para mostrar posibles formas de escribir esa pregunta con software. La parte de carpintería busca presentar algunas técnicas y prácticas necesarias (no suficientes) para poder obtener resultados computacionales reproducibles.

II Objetivos

El objetivo principal del curso es presentar algoritmos y técnicas básicas para:

- resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales
- analizar y describir datos con técnicas estadísticas basadas en métodos Monte Carlo,
- desarrollar esquemas reproducibles para el análisis de datos científicos.

III Competencias a desarrollar

Al finalizar el curso, se espera que el estudiante esté en capacidad de:

- manejar dos lenguajes de programación modernos de computación numérica: uno de alto nivel y otro de bajo nivel,
- implementar algoritmos sencillos para la resolución de ecuaciones diferenciales y para el análisis estadístico exploratorio de datos,
- desarrollar un esquema sencillo para obtener resultados computacionales reproducibles.

IV Contenido por semanas

Semana 1

- Temas: Presentación del curso. Unix. Consola. Comandos básicos. Editores de texto. Intérprete de Python. Variables. Aritmética. Listas. Diccionarios.
- Lecturas preparatorias. Videos `Introducción a Unix: primera parte`, `Introducción a Unix: segunda parte`, `Introducción a Python: primera parte`, `Python: listas y strings`.
- Talleres: Prueba de diagnóstico (sin nota).

Semana 2

- Temas: If/while/break/continue. Ciclos. Funciones. Arreglos (numpy). Lectura y escritura de archivos (numpy). Gráficas y visualización (matplotlib), Objetos.
- Lecturas preparatorias. Videos `Intruducción a Python: segunda parte`, `Programación Orientada a Objetos en Python`, `Python: Funciones, tipos de variables y recursividad.`, `Numpy con IPython`, `import matplotlib as plt` (los dos últimos videos usan Ipython, no es necesario que uds. lo hagan asi.).
- Talleres:

Semana 3

- Temas: Integrales. Interpolación.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 6 (Integration)
- Talleres: Publicación Taller #1 (Unix, Python, integrales, derivadas).

Semana 4

- Temas: Derivadas. Raíces de ecuaciones.
- Lecturas preparatorias: Capítulos 7.I (Numerical Differentiation) y 7.II (Trial-and-Error Searching) del libro de Landau.
- Talleres: Publicación Taller #1 (Unix, Python, integrales, derivadas).

Semana 5

- Temas: Solución de sistemas de ecuaciones lineales.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 8 (Matrix Equation Solutions) del libro de Landau.
- Talleres: Ejercicio #1.

Semana 6

- Temas: Autovalores y autovectores. Principal Component Analysis.
- Lecturas preparatorias: Secciones 6.3.1 (Principal Component Regression) y 10.2 (Principal Component Analysis) del libro ISL.
- Talleres: Entrega Taller #1. Publicación Taller #2 (Sistemas de ecuaciones, autovalores, principal component analysis.).

Semana 7

- Temas: Transformadas de Fourier
- Lecturas preparatorias: Capítulo 10 (Fourier Analysis) del libro de Landau.
- Talleres: Ejercicio#2.

Semana 8

- Temas: Git. Github.
- Videos de la serie `Version Control with Git` en Software Carpentry.
- Talleres:

Semana 9

- Temas: Makefile. Unit Tests.
- Lecturas preparatorias: Videos de la serie `Automation and Make` en Software Carpentry.
- Talleres: Publicación Taller #4 (Ecuaciones Diferenciales Parciales).

Semana 10

- Temas: C++.
- Lecturas preparatorias: ??
- Talleres: Entrega Taller #3.

Semana 11

- Temas: C++.
- Lecturas preparatorias: ??
- Talleres: Entrega Taller #3.

Semana 12

- Temas: Ecuaciones diferenciales ordinarias.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 9 (ODEs) del libro de Landau.
- Talleres: Entrega Taller #2. Publicación Taller #3 (Transformada de Fourier, Ecuaciones Diferenciales Ordinarias).

Semana 13

- Temas: Ecuaciones diferenciales parciales.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 17 (PDEs) del libro de Landau.
- Talleres: Ejercicio #3.

Semana 14

- Temas: Conceptos básicos de probabilidad y estadística. Procesos aleatorios.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 1 (The Basics) del libro de Sivia&Skilling.
- Talleres: Ejercicio #4.

Semana 15

- Temas: Métodos de Monte Carlo.
- Lecturas preparatorias: Capítulo 1 (Monte Carlo Methods) del libro de Krauth.
- Talleres: Entrega Taller #4. Publicación Taller #5 (Métodos de Monte Carlo, estimación bayesiana de parámetros).

Primera semana de finales

- Talleres: Entrega Taller #5.

V Metodología

Las *habilidades computacionales* se desarrollan trabajando activamente. Por esto en las sesiones magistrales, luego de presentar un resumen de los conceptos teóricos, se hará énfasis en la práctica y experimentación. Para que esto funcione es necesario que los estudiantes estudien el tema correspondiente **antes de cada clase** siguiendo las lecturas preparatorias recomendadas. En el *Laboratorio de Métodos Computacionales* habrá más tiempo para practicar lo visto en la clase magistral, hacer ejercicios y aclarar dudas.

La Magistral y el Laboratorio cuentan con repositorios en GitHub:

<https://github.com/ComputoCienciasUniandes/MetodosComputacionales>.

<https://github.com/ComputoCienciasUniandes/MetodosComputacionalesLaboratorio>.

VI Criterios de evaluación

La Magistral y el Laboratorio se califican por separado. Habrá exámenes, talleres y ejercicios.

Al comienzo del semestre se hará un examen (corto, sin nota) para diagnosticar el conocimiento general que ya tienen los estudiantes sobre los temas del curso.

Las diferentes componentes que reciben calificación en la Magistral son las siguientes

- Cinco talleres para resolver de manera individual por fuera del horario de clase. Cada taller tiene un valor del 14 % de la nota definitiva.

- Ejercicios para resolver de manera individual en cada sesión Magistral. Las soluciones se deben entregar al final de cada clase. Se elegirán al azar 4 de estos ejercicios para ser calificados. El promedio de esas 4 notas tiene un valor del 15 % de la nota definitiva. Esta contribución a la nota definitiva será de cero (0.0) si se dejaron de entregar **tres** o más de estos ejercicios.
- Un examen final (con una componente escrita y otra de programación) con un valor del 15 % de la nota definitiva.

En el Laboratorio habrá quince ejercicios cortos para desarrollar y entregar en clase. Se licalificarán 6 de esos ejer Cada ejercicio corresponde a un 20 % de la nota final del Laboratorio.

De acuerdo a la nota definiva en el Laboratorio habrá **otro bono** en la nota definitiva de la Magistral. Siendo x la nota de Laboratorio, el bono correspondiente se calcula así: $4,0 < x \leq 4,4 \rightarrow 0,1$, $4,4 < x \leq 4,8 \rightarrow 0,2$, $4,8 < x \leq 5,0 \rightarrow 0,4$.

Todos los exámenes, talleres y ejercicios serán **individuales**. Si en las entregas se detecta que el trabajo no fue individual (esto incluye colaboración con personas no inscritas en el curso), entonces la nota de todos los talleres quedará automáticamente **en cero** y se llevará el caso a comité disciplinario.

Todas las entregas de talleres y ejercicios se harán a través de SICUA. **No se aceptará ninguna tarea por fuera de esa plataforma**, a menos que ocurra un una falla en los servidores de SICUA que afecte a **todos** los estudiantes del curso.

VII Bibliografía

Bibliografía principal:

- *A survey of Computational Physics - Enlarged Python Book* . R. H. Landau, M. J. Páez, C. C. Bordeianu. WILEY. 2012. <https://psrc.aapt.org/items/detail.cfm?ID=11578>
- *Data Analysis: A Bayesian Tutorial*. D. S. Sivia, J. Skilling. Second Edition, Oxford Science Publications. 2006.
- *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. W. Krauth, Oxford Univ. Press.
- *An Introduction to Statistical Learning*. G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani, Springer. <http://www-bcf.usc.edu/~gareth/ISL/>
- *The C programming language*. B. Kernighan & D. Ritchie, Second Edition, Prentice Hall.
- Videos del curso Herramientas Computacionales que muestran los fundamentos de Unix y Python https://www.youtube.com/playlist?list=PLHQtzvthdVM_MGC9dPFKe4hPAwBd_7RJ3
- <http://software-carpentry.org/>

Bibliografía secundaria:

- *Elements of Scientific Computing* Tveito A., Langtangen H.P., Nielsen B.F., Cai X. Spinger. 2010.
- *Introduction to Computation and Programming Using Python*, Gutttag, J. V. The MIT Press. 2013.
- <http://xkcd.com/>