

MÉTODOS COMPUTACIONALES

(FISI 2028)

Curso de vacaciones 2015

Profesor: Juan David Lizarazo, email: jd.lizarazo10

Oficina: I113 // Horario de atención: martes de 8 a 10 AM.



Departamento de Física

“Computers are incredibly fast, accurate and stupid. On the other hand, a well trained operator as compared with a computer is incredibly slow, inaccurate and brilliant.” Together they are powerful beyond imagination.
≈ LEO CHERNE - 1969

En nuestro curso queremos aprender métodos para resolver diferentes problemas numéricos e implementarlos en algún lenguaje de programación para resolver problemas de interés. En ocasiones vamos a tomar datos del mundo “real” y en otras del mundo simulado pero siempre vamos a estar interesados en las formas de procesarlos y visualizarlos, y en extraer información de ellos. Para ello vamos a refinar las herramientas computacionales que ya conocemos y a aprender otras nuevas: un poco más de **Python** y **Bash**, **GitHub** para colaborar al estilo moderno, y algo de **C** entre otras. Ayudados de nuevas herramientas vamos a explorar el interesante mundo que se pone a nuestro alcance: desde los misterios de π , pasando por la fabulosa internet hasta el movimiento del sistema solar.

El curso va a evaluarse a partir de tres items: talleres (60 %), exámenes cortos (25 %) y un proyecto final (15 %). Los talleres cada semana y los exámenes cada dos.

Para coordinar nuestras actividades contamos con **Sicua**, y en **GitHub** con un [repositorio del curso](#) y cada quien con uno individual.

Semana 1: **bash**, **wget**, **curl**, **awk**, **sed**, **grep**, **sort**, expresiones regulares, **ssh**, **sftp**, **vi/emacs**, **git**, **GitHub** individual.

Semana 2: **C**, **gcc**, **gnuplot**, **Python**, **Markdown**, complejidad computacional, manejo de excepciones, **make**, error e incertidumbre en cálculos numéricos.

Semana 3: álgebra lineal, **IPython**, herramientas de visualización (gráficas en 3D y animaciones).

Semana 4: interpolación, testing and debugging, **GitHub** en colaboración, análisis de Fourier, procesamiento de imágenes.

Semana 5: integración y diferenciación numéricas, ecuaciones diferenciales ordinarias (1er orden), **NumPy**.

Semana 6: ecuaciones diferenciales ordinarias (2do orden).

Semana 7: ecuaciones diferenciales parciales.

Semana 8: métodos Monte Carlo, generación de números pseudoaleatorios.

Semana 9: proyecto final.

Temas opcionales: **R**, **Machine Learning**, métodos de optimización, dinámica molecular, geometría computacional, uso del clúster, **Zotero**, **Pandas**, procesamiento en paralelo.

-
- R. Landau, M. Paez, C. Bordeianu. [A Survey of Computational Physics: Python Multimodal eBook](#), 2012.
 - J. Guttag. [Introduction to Computation and Programming Using Python](#), 2013.
 - A. Tveito, H. Langtangen, B. Nielsen, X. Cai [Elements of Scientific Computing](#), 2010.
 - S. Chacon, B. Straub. [Pro Git](#), 2014.
 - B. Stephenson. [The Python Workbook](#), 2015.
 - C. Johnson. [Pro Bash Programming](#), 2009.
 - I. Horton. [Beginning C](#), 2006.
 - B. Kernighan & D. Ritchie. *The C programming language*.
 - P. Scherer, [Computational Physics](#), 2010.
 - R. Shonkwiler, F. Mendivil. [Explorations in Monte Carlo Methods](#), 2009.
 - J. Hunter, D. Dale, E. Firing, M. Droettboom [Matplotlib 1.4.3](#)
 - <http://software-carpentry.org/>