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.

 \approx 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, testing and debugging, complejidad computacional, manejo de excepciones, make, error e incertidumbre en cálculos numéricos.

Semana 3: algebra 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.
- http://software-carpentry.org/

0