

MÉTODOS COMPUTACIONALES 1

NOMBRE DEL CURSO: Métodos Computacionales 1

CÓDIGO DEL CURSO: FISI-2526

UNIDAD ACADÉMICA: Departamento de Física

PRERREQUISITOS: Introducción a la Programación (ISIS-1221). Álgebra Lineal I (MATE-1105).

CRÉDITOS: 3

PERIODO ACADÉMICO: 202210

HORARIO: Mi y Vi, 11:00 a 12:15

NOMBRE PROFESOR MAGISTRAL: Diego Hernando Useche Reyes

CORREO ELECTRÓNICO: dh.useche@uniandes.edu.co

HORARIO Y LUGAR DE ATENCIÓN: con cita previa

NOMBRE PROFESOR COMPLEMENTARIA: John Erick Cabrera Ramirez

CORREO ELECTRÓNICO: je.cabrera@uniandes.edu.co

HORARIO DE ATENCIÓN: con cita previa.

REPOSITORIO DEL CURSO: <https://github.com/diegour1/MetodosComputacionales1>

I Introducción

Los métodos computacionales son un aspecto inseparable de cualquier área de trabajo en ciencia e ingeniería. Esto se debe a la facilidad de acceso a computadoras programables y su aumento exponencial en capacidad de procesamiento. Estos recursos para el cómputo sólo se puede aprovechar si las personas interesadas son capaces de utilizarlos tecnología de manera eficiente. De manera complementaria, la obtención y comprensión de los resultados obtenidos con estos métodos computacionales requieren una comprensión básica de probabilidad y estadística.

II Objetivos

En el curso se presentan algoritmos y técnicas computacionales básicas para:

- resolver numéricamente problemas que involucren derivadas, integrales y sistemas de ecuaciones algebraicas.
- analizar datos y modelos con conceptos probabilísticos y métodos estadísticos.

III Competencias a desarrollar

Al finalizar el curso, se espera que el estudiante adquiera las siguientes habilidades.

- Usar herramientas de Python para análisis estadístico de datos, para la solución de problemas en ciencias y otras áreas.
 - Implementar computacionalmente modelos físico-matemáticos para el análisis de datos utilizando **clases** y **funciones**.
 - Utilizar de la biblioteca **pandas** para el manejo eficiente de los datos teniendo en cuenta los siguientes procedimientos: preprocesamiento, re-formato de columnas y normalización.
 - Utilizar la biblioteca **numpy** en la implementación de los algoritmos matemáticos que representen los diferentes sistemas en estudio.
 - Utilizar la biblioteca **matplotlib** para visualizar datos.

- Solucionar numéricamente problemas sencillos de cálculo diferencial, cálculo integral y álgebra lineal: cálculo de integrales, cálculo de derivadas, sistemas de ecuaciones lineales, integración de funciones, problemas de valores propios.
 - Calcula numéricamente la primera y segunda derivada de funciones de una variable.
 - Calcula numéricamente integrales unidimensionales definidas e indefinidas con los métodos siguientes: trapecio, y cuadratura gaussiana.
 - Encuentra numéricamente la solución a sistemas de ecuaciones algebraicas lineales.
 - Utiliza bibliotecas de álgebra lineal para calcular valores y vectores propios.
 - Interpreta los vectores y valores propios de una matriz de covarianza como herramientas para la reducción de dimensionalidad de un conjunto de datos.
- Analizar datos usando apropiadamente conceptos básicos de probabilidad y estadística en la solución de problemas en ciencias y otras áreas: variables aleatorias, valores esperados, métodos de Monte-Carlo, pruebas de hipótesis:
 - Diferenciar distribuciones de probabilidad comunmente encontradas en ciencias: normal, poisson, log-normal, etc.
 - Hacer histogramas para identificar la distribución de los datos como función de una variable específica.
 - Estimar la moda, media, mediana, desviación estandar, curtosis y otros momentos de series de datos.
 - Realizar pruebas cuantitativas para ver si dos series de datos corresponden a la misma distribución de probabilidad.
 - Utilizar datos para proponer modelos paramétricos y acotar los terminos libres de este.
 - Solucionar sistemas de ecuaciones algebraicas lineales.
 - Resolver problemas de mínimos cuadrados, planteados desde el sistema de ecuaciones lineales correspondiente.
 - Realizar reducción de dimensionalidad de datos a través del método de componentes principales.

IV Contenido por semanas

Semana 1

- Temas: Presentación del curso. Uso de Python en la nube. Comandos básicos Unix. Repaso de Python: variables, listas, iteración diccionarios, lectura de archivos, condicionales.

Semana 2

- Temas: Repaso de Python: funciones, clases, objetos, numpy, matplotlib.

Semana 3

- Temas: Derivadas. Raíces de ecuaciones.

Semana 4

- Temas: Interpolación.

Semana 5

- Temas: Integración.

Semana 6

- Temas: Solución de sistemas de ecuaciones lineales. Ajustes por mínimos cuadrados con métodos matriciales.

Semana 7

- Temas: Autovalores y autovectores. Análisis de Componentes Principales.

Semana 8

- Temas: Regresión.

Semana 9

- Temas: Introducción a la estadística. Estadística descriptiva.

Semana 10

- Temas: Elementos básicos de probabilidad.

Semana 11

- Temas: Variables aleatorias y valores esperados.

Semana 12

- Temas: Variables aleatorias especiales.

Semana 13

- Temas: Distribuciones de estadísticas de muestreo.

Semana 14

- Temas: Estimación de parámetros.

Semana 15

- Temas: Prueba de hipótesis.

Semana 16

- Temas: Repaso del semestre.

V Metodología

Los 3 créditos del curso corresponden a 9 horas de dedicación semanal. Cada semana habrá 3,75 horas sincrónicas distribuidas en $2 \times 1,25 = 2,5$ horas de magistral y 1,25 horas de complementaria. Las 5,25 horas restantes corresponden a trabajo individual para la preparación de los contenidos de la semana. De esto sugerimos dedicarle 4 horas a la magistral y 1,25 horas a la complementaria. **La clase magistral tiene un porcentaje de 75 % y la complementaria de 25 %.**

- Las clases sincrónicas de la magistral serán por zoom y tendrán una duración de 75 minutos para presentar la parte teórica del tema del día, mostrar un ejemplo de implementación y resolver las dudas que se tengan sobre el tema del día.

Para el desarrollo de la clase se usará el ambiente Binder accesible desde el repositorio del curso.

VI Criterios de evaluación

Aproximadamente se dejará una tarea cada dos semanas en parejas. Algunos ejercicios de la tarea se evaluarán basados en el resultado final, otros ejercicios pueden tener varias partes (o parte analítica) y se evaluarán si están correctas y completas las partes. Cada ejercicio del cual se evalúa principalmente su parte final recibe el siguiente porcentaje de calificación:

- Entrega de código fuente que incluye las funciones, algoritmos y procedimientos que se solicitan en el enunciado: 1,5.
- El código corre sin errores dentro del intérprete de python (en binder): 3,0.
- El ejercicio tiene un error pequeño y se acerca a la respuesta: 4,0
- El código produce la respuesta correcta: 5,0.

El porcentaje de las tareas es el 80 % de la magistral y el 20 % faltante corresponderá a un proyecto en parejas, el cual se entregará en las últimas semanas del semestre. El proyecto se evaluará de acuerdo a lo siguiente:

- 5 % propuesta del proyecto.
- 15 % entrega del proyecto.

La nota definitiva se reporta con una cifra decimal. Todas las entregas de talleres y proyecto se harán a través de la plataforma Bloque-neón. **No se aceptará ninguna asignación por fuera de esa plataforma**, a menos que ocurra una falla en los servidores que afecte a **todos** los estudiantes del curso. Finalmente, no se toman en cuenta entregas realizadas por correo electrónico fuera de los tiempos estipulados.

Todas las entregas son **individuales o en parejas**. Las **únicas fuentes autorizadas** para reutilización de código son: el repositorio del curso y los libros de la bibliografía principal. En casos de copia entre parejas, se llevará el caso a comité disciplinario y la nota del curso queda como Pendiente Disciplinario hasta que el comité tome alguna decisión.

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>
- *Introduction to Probability and Statistics for Engineers and Scientists*. Sheldon M. Ross. Third Edition. Elsevier Academic Press. 2004.

Bibliografía secundaria:

- *A student's guide to numerical methods*, I. H. Hutchinson. Cambridge University Press. 2015.
- *Introduction to statistics with python*. Thomas Haslwanter. Springer. 2016.
- *Pattern recognition and Machine Learning*. Christopher Bishop. Springer. 2011.
- *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/>
- *Elements of Scientific Computing* Tveito A., Langtangen H.P., Nielsen B.F., Cai X. Springer. 2010.
- *Introduction to Computation and Programming Using Python*, Gutttag, J. V. The MIT Press. 2013.