

Herramientas computacionales

El presente documento constituye una constancia de la información general, pautas y normas bajo las cuales se desarrolla el curso "Herramientas computacionales".

Docente

Edward Yesid Villegas: ingeniero físico y magíster en física aplicada de la Universidad EAFIT cuyos trabajos de grado se centraron en el uso de la simulación de fenómenos de mecánica cuántica aplicados al diseño y caracterización de materiales, y actual estudiante del doctorado de Computación Científica de la Universidad de Medellín en la línea de simulación de plasmas astrofísicos.

Contacto

Correo: evillegas@udem.edu.co

Asesoría: Los días jueves y viernes son asesorías de otras materias, pero que en ausencia de estudiantes de estas puedo atenderlos.

- Exclusivo: Martes 10 A.M. a 11:30 A.M.
- Exclusivo: Viernes 11 a 11:30 A.M.
- Jueves (prioridad métodos y física): 2 a 4 P.M.
- Viernes (prioridad física): 9 a 11 A.M.

Requisitos recomendables

- Haber cursado las siguientes materias:
 - Introducción a la computación científica.
 - Fundamentos de programación.
- ¡Ganas de aprender!

Horario y asistencia

La asistencia al curso de Herramientas Computacionales no es obligatoria pero si recomendable, salvo que se trate de la presentación de una actividad evaluativa. El resumen de todas las clases se encontrará en formato pdf (con sus fuentes en tex, md o ipynb según el tema) en estilo de documento de texto, los cuales puede consultar de manera virtual o imprimir si lo desea. Recuerde periódicamente validar si existe alguna actualización del material, el cual se encuentra en continua revisión ([enlace](#)).

La duración de las sesiones se estima en 1 hora y 45 minutos máximo.

Grupo	Día	Hora	Pestaña
01	Miércoles	10 A.M. - 12 M.	HC01W10

Temas

El microcurriculo del curso puede consultarse en el siguiente [documento](#), pero un resumen de las temáticas corresponde a la siguiente lista.

- Contexto de las herramientas computacionales (presentación del curso).
- Documentación científica y de software.
 - Jupyter Notebook.
 - LaTeX.
- Introducción a Linux.
- Control de versiones.
 - Git.
 - GitHub.
- Sistemas de álgebra computacional.
 - Sympy.
 - Maxima.
- Procesamiento de texto y *web scrapping*.
- Procesamiento de datos con herramientas estadísticas y bases de datos.
 - MySQL.
 - SQLite.
 - R.
- Visualización de datos.
 - GnuPlot.

- Paraview/VTK.

El fin de este curso es aprender a solucionar diversos problemas con ayuda e integración de diversas herramientas computacionales que permiten automatizar, explorar, manipular, analizar y visualizar datos. Se desarrolla una metodología que será transversal a distintas disciplinas desde las humanidades y las artes hasta las ingenierías y ciencias físicas.

Textos guías

Consulte los textos en la carpeta dropbox: [Textos](#) (pendientes de sincronizar).

Evaluación

El curso de “Métodos Numéricos” se evaluará acorde al siguiente esquema:

Semana	Fecha	Porcentaje	Actividad	
4	Agosto 20	10	T1	Individual
7	Septiembre 10	10	T2	Grupal
8	Septiembre ~14	25	P	Individual
11	Octubre 8	10	PA1	Grupal/Individual
13	Octubre 22	10	PA2	Grupal/Individual
15-¿16?	Noviembre 5-¿12?	5	PA3	Grupal/Individual
17	Noviembre ~16	25	F	Individual

La presentación de los talleres (T) y proyectos de aula (PA) se harán en repositorios github públicos, con documentos basados en **LaTeX** y/o **Jupyter**. Los talleres se dispondrán con al menos dos semanas de anticipación a la fecha de entrega (hasta la terminación del día para la realización del último *push* válido).

El tema del proyecto de aula es de libre elección, acorde a sus intereses siempre y cuando cumpla con los requerimientos mínimos exigidos.

- Datos libres/abiertos/públicos: La fuente de datos debe cumplir esta

característica debido a que su proyecto será alojado en un repositorio público. Si desea trabajar sobre datos de carácter confidencial/privativos/comerciales, cree un conjunto de datos ficticio o reemplace por datos del mismo estilo que no sean restrictivos (y posteriormente reproduzca la metodología).

- Su proyecto debe ser desarrollado bajo ambiente linux.
- La documentación asociada al proyecto debe realizarse en Jupyter Notebooks o LaTeX.
- Su proyecto debe alojarse en su totalidad en un repositorio público git en el servicio de github.
- Debe requerir de procesamiento de texto y uso al menos básico de utilidades para manejo de datos en la web.
- El proyecto debe tener una etapa de análisis estadístico (que realizará con R y MySQL/SQLite) o calculo extenso algebraico (que realizará con Sympy o Maxima).
- Debe presentarse una visualización asociada a los análisis de los datos con Paraview o Gnuplot.

Equipos de trabajo

Los equipos de trabajo son de 2 a 3 estudiantes para la realización de las actividades de carácter grupal.

Consulta de notas

Las notas de su curso se registraran máximo una semana después de la presentación de la actividad evaluativa en la planilla dada por el siguiente [enlace](#). Conserve la retroalimentación de su actividad por lo menos hasta que observe el registro de su nota en esta planilla.

En la planilla consulte la pestaña que inicia por HC seguido del número de grupo con la inicial del día de la primera sesión de la semana (w para el miércoles) y hora de inicio en formato de 24 horas. Una vez en la pestaña indicada, consulte sus notas en la fila que posea su documento de identidad conforme se encuentra registrado en el sistema al inicio del curso.

Normas documentos

Los documentos se especificarán un conjunto de normas para su presentación, las

cuales son de cumplimiento obligatorio.

Software requerido

Sistema Operativo Linux

Se recomienda como distribución linux para su uso, [Ubuntu](#) LTS (16.04, 14.04). Las versiones LTS aseguran mayor estabilidad y soporte extendido (5 años) a costo de paquetes que no son muy recientes, en contraste de las versiones RR que pueden tener paquetes muy nuevos pero tienen a ser inestables por pasar por cortos periodos de tiempo en la etapa de prueba.

Si su equipo posee bajas características de hardware, puede usar derivados de Ubuntu como [Lubuntu](#) y [Linux Mint](#) que se enfocan en este tipo de equipos, y de gran utilidad si son equipos portátiles.

Python

[Python](#) es un lenguaje de programación multiparadigma de amplio uso en las ciencias computacionales y computación científica, pero igualmente con una amplia comunidad en disciplinas distintas a estas. Su implementación oficial/referencia es CPython, y actualmente se encuentran vigentes las versiones Python 2 (en modo de actualizaciones de seguridad) y Python 3 (en desarrollo activo). La *PSF* recomienda el uso de python 3 para los usuarios/desarrolladores nuevos, y para los antiguos mantener python 2 solo si es realmente requerido por motivos de compatibilidad.

La mayor parte de distribuciones linux vienen por defecto con python 2. Si no es así o si requiere python 3, podrá instalarlos por diversos métodos:

- Repositorios oficiales de la distribución linux. Ejemplo en sistemas debian/ubuntu:

```
sudo apt -y install python3
```
- Distribución [Anaconda](#). Si carece de internet, posee dificultades en la estabilidad de la red o un plan de consumo por contenido descargado, descargue externamente el instalador de la distribución, el cual contiene para instalación por defecto una gran cantidad de paquetes python de uso frecuente en la computación científica, con sus dependencias. Algunos son:

- python.
 - conda.
 - jupyter.
 - spyder.
 - ipython.
 - numpy.
 - scipy.
 - sympy.
 - pandas.
 - matplotlib.
- Distribución [Miniconda](#). Es una versión ligera de Anaconda, el cual instala por defecto solo el gestor de paquetes `conda` y `python`. Útil para equipos con bajas características de hardware o para una rápida descarga.

Jupyter, sympy y otros paquetes python

Para estos paquetes usados en el curso, si la instalación fue realizada con la distribución Anaconda, ya los tendrá instalados.

Si realizo la instalación usando Miniconda, deberá proceder desde la consola de la siguiente manera:

```
conda install jupyter sympy
```

Si usa la instalación de los repositorios o manual (no recomendada esta última), necesitará el gestor de paquetes [pip](#) con el fin de instalar de la manera más simple las versiones más recientes de los paquetes (algunos vienen incluidos en los repositorios del sistema operativo). Para un sistema debian/ubuntu necesitaremos permiso de administrador y ejecutamos:

```
sudo apt -y install python3-dev python3-pip  
sudo pip3 install sympy ipython[all] jupyter
```

Si desea la versión de los paquetes en python 2, simplemente omita el 3 al lado de python. El paquete dev es requerido como dependencia de múltiples paquetes que encontraremos al instalar con `pip` que en el caso de `conda` no es requerido ya que este empaqueta todas las dependencias (esto facilita la instalación, incluso en

windows). Igualmente con `pip` requerimos de la instalación de dependencias adicionales por medio del repositorio de la distribución linux o manuales.

LaTeX

LaTeX es un procesador de texto científico, en el cual el objetivo es enfocarse en el contenido y no en la forma. Es idóneo para el manejo de documentos con abundantes ecuaciones, referencias cruzadas y citaciones. Los documentos se realizan usando un lenguaje de marcado.

Su instalación requiere de un compilador (en linux corresponde a `texlive`) y un editor (recomendado `texmaker`). Igualmente, como algo opcional, se recomienda un manejador bibliográfico, como lo es `jabref`. En sistemas debian/ubuntu:

```
sudo apt -y install texlive texlive-bibtex-extra texlive-science \
texlive-latex-recommended texlive-fonts-recommended \
texlive-lang-spanish texmaker texlive-publishers jabref
```

Maxima

Maxima es un paquete de álgebra computacional libre, abierto y multiplataforma con cliente de comandos. Puede usar una interfaz gráfica externa, comúnmente asociado con `WxMaxima`.

```
sudo apt -y install maxima wxmaxima
```

Control de versiones

Se requiere para este tema la creación de una cuenta [github](#) y la instalación del paquete `git`.

```
sudo apt -y install git
```

Visualización de datos

```
sudo apt -y install gnuplot paraview-dev vtk6
```

Análisis de datos

```
sudo apt -y install r-base-dev sqlite3 libsqlite3-dev \  
sqlitebrowser mysql-client mysql-server
```