

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: 202410

HORARIO: Martes y Jueves, 5:00pm a 6:20pm

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: Santiago Henao Castellanos

CORREO ELECTRÓNICO: s.henao10@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 problemas de las ciencias con métodos numéricos usando el lenguaje de programación de **python**.
- Resolver numéricamente problemas que involucren derivadas e integrales.
- Resolver numéricamente problemas que involucren temas del algebra lineal como sistemas de ecuaciones lineales y matrices.
- 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 algebraicos 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. Cuadratura Gaussiana.

Semana 6

- Temas: Solución de sistemas de ecuaciones lineales. Regresión. Minimos cuadrados.

Semana 7

- Temas: Ajustes por mínimos cuadrados con métodos matriciales. Método de la gradiente descendiente.

Semana 8

- Temas: Autovalores y autovectores. Inversa y determinante de matrices. Cadenas de Markov.

Semana 9

- Temas: Elementos básicos de probabilidad.

Semana 10

- Temas: Métodos de Monte Carlo.

Semana 11

- Temas: Teoría Bayesiana.

Semana 12

- Temas: Variables aleatorias. Promedio. Varianza. Valores esperados.

Semana 13

- Temas: Distribuciones estadísticas de muestreo. Teorema del límite central.

Semana 14

- Temas: Matriz de covarianza. Distribución normal multivariada. Análisis de componentes principales.

Semana 15

- Temas: Prueba de hipótesis. Teoría del error. Estimación de parámetros con Metropolis Hastings.

Semana 16

- Temas: Adicionales. Estimación de máxima verosimilitud.

V Metodología

Los 3 créditos del curso corresponden a 9 horas de dedicación semanal. Cada semana habrán dos sesiones magistrales de 1:20 y una sesión de 1:20 de complementaria. Las 5:00 horas restantes corresponden a trabajo individual para la preparación de los contenidos de la semana. **La clase magistral tiene un porcentaje de 75 % y la complementaria de 25 %.**

- El curso se puede dividir en dos partes principales. La primera parte de la semana 1 a la 8 sobre programación básica y métodos numéricos computacionales del cálculo y el álgebra lineal. La segunda parte del curso semana 9 a la 16 el curso estará enfocado a métodos numéricos y computacionales de la estadística.
- En el horario de la clase magistral se dedicará en primer lugar a la explicación de los conceptos y desarrollos matemáticos y la segunda mitad se implementará el código asociado a dichos conceptos.
- La sección magistral se evaluará a partir de talleres y exámenes.

Para el desarrollo de la clase se usará el ambiente Binder accesible desde el repositorio del curso, y el sistema de Jupyter en la nube Google Colab.

VI Criterios de evaluación

La evaluación del curso tiene tres componentes: 45 % talleres, 30 % dos exámenes (cada uno 15 %), 25 % complementaria.

- Talleres: Cada semana y media se asignará un taller con 3 a 5 ejercicios para entregar en parejas.
- Exámenes: Habrán dos exámenes a lo largo del semestre. Los exámenes se realizarán en el horario de clase. El primer examen cubrirá la primera parte del curso y el segundo examen cubrirá la segunda parte. Los exámenes son individuales.

Cada ejercicio de los talleres y/o exámenes tendrá uno o más secciones y cada sección recibe el siguiente porcentaje de calificación:

- No entrega código: 0 %.
- Entrega de código fuente que incluye las funciones, algoritmos y procedimientos que se solicitan en el enunciado: 30 %.
- El código corre sin errores dentro del intérprete de Python de Binder y/o Google Colab y tiene al menos una parte del ejercicio correcta: 30 %.
- El ejercicio es casi correcto, tiene un error mínimo. 20 %.
- El código produce la respuesta correcta: 20 %.

La nota definitiva se reporta en Bloque Neón y Banner con dos cifras decimales. Todas las entregas de talleres y ejercicios se harán a través de la plataforma Bloque-neón. **No se aceptará ninguna tarea 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. **La nota semanal se puede modificar únicamente dentro de los próximos 3 días calendario.** En caso faltar a una actividad por ausencia se permiten 3 días calendario para justificar la ausencia. Solamente serán válidas las excusas médicas emitidas por instituciones, centros o empresas prestadoras de servicios de salud; es decir que las excusas emitidas por médicos particulares no serán válidas.

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 distintas parejas en los talleres, o con los otros compañeros (incluido la pareja del grupo) en el examen final, la actividad tendrá una calificación de cero (no modificable), se llevará el caso a comité disciplinario y la nota del curso quedará como Pendiente Disciplinario hasta que el comité tome alguna decisión.

VII Bibliografía

Bibliografía principal:

- *Notas de clase: Métodos computacionales.* Segura, Alejandro.
- *Probabilidad.* Castañeda, Liliana Blanco. Univ. Nacional de Colombia. 2004.
- *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,* Guttag, J. V. The MIT Press. 2013.