

LABORATORIO DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

NOMBRE DEL CURSO: Laboratorio de Métodos Computacionales

CÓDIGO DEL CURSO: FISI 2029

PROFESOR: Diego Hernando Useche Reyes

CORREO: dh.useche@uniandes.edu.co

UNIDAD ACADÉMICA: Departamento de Física

CORREQUISITOS: Métodos Computacionales (FISI 2028)

REPOSITORIO: <https://github.com/diegour1/LabMetodosComputacionales>

I Introducción

El uso de los métodos computacionales es de gran utilidad en la Ciencia, desde la solución computacional de expresiones matemáticas complejas hasta la simulación de sistemas cuya solución y entendimiento no era posible antes. Aprender a implementar estos métodos junto con las nuevas herramientas computacionales brindan un sólido conocimiento que permite abordar múltiples problemas de interés en Ciencia.

II Objetivos

Desarrollar las habilidades necesarias para escribir en un lenguaje de programación los algoritmos numéricos para:

- Estimar derivadas e integrales.
- Solucionar sistemas de ecuaciones lineales.
- Describir datos con técnicas estadística basadas en métodos de Monte Carlo.
- Resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales.
- Desarrollar esquemas reproducibles para el análisis de datos científicos.

III Contenido por semanas

Semana 1 Presentación del curso, práctica con consola de Unix, primera práctica de repaso de python (intérprete de python, funciones, ciclos, variables locales y globales, lectura y escritura de datos), práctica con git y GitHub.

Lecturas preparatorias: Capítulo "Getting started" del libro Pro git [1]
, secciones 1 y 2 del tutorial de kaggle [2] y capítulos 1, 2 y 3 de la documentación oficial de python [3].

Semana 2 Segunda práctica repaso de Python (manejo de librerías, matplotlib, operaciones con arreglos usando numpy y detalles del broadcasting)

Lecturas preparatorias: Página 3 a la 25 de la documentación de matplotlib [4], página 2 a la 8 de "Aprendizaje Matplotlib"[5], capítulos 1 y 2 [6].

Semana 3 Implementación de la derivación numérica y aproximación a raíces reales de ecuaciones.

Lecturas preparatorias: Capítulos 7.I y 7.II (Differentiation & Searching) del libro de Landau.

Semana 4 Implementación de la integración numérica por la regla del rectángulo, la regla del trapecio y la regla de simpson. Implementación de la interpolación lineal, cúbica, bilineal y de lagrange.

Lecturas preparatorias: Capítulo 6 (Integration) del libro de Landau.

Semana 5 Implementación de métodos de Monte Carlo.

Lecturas preparatorias: Capítulo 1 (The basics) del libro de Silvia & Skilling, Capítulo 5 (Monte Carlo Simulations) del libro de Landau.

Semana 6 Implementación numérica para la estimación bayesiana de parámetros e implementación del algoritmo de Metropolis Hastings.

Lecturas preparatorias: Capítulo 6 (Integration) del libro de Landau.

Semana 7 Practica de introducción a C++, sintaxis, tipos de variables, ciclos, condicionales, funciones y uso de librerías.

Lecturas preparatorias: Capítulo 4 del libro de Deitel.

Semana 8 Make files y continuación de la practica de C++; arreglos, apuntadores y programación orientada a objetos.

Lecturas preparatorias: Capítulo 3 del libro de Deitel.

Semana 9 Implementación numérica de técnicas de solución de sistemas de ecuaciones lineales y ajuste por mínimos cuadrados.

Lecturas preparatorias: Capítulo 8 (Matrix Equation Solutions) del libro de Landau.

Semana 10 Implementación de búsqueda de autovalores y autovectores.

Lecturas preparatorias: Secciones 6.3.1 (Principal Component Regression) y 10.2 (Principal Component Analysis) del libro An Introduction to Statistical Learning.

Semana 11 Aplicación de transformada de Fourier discreta, señales y filtros.

Lecturas preparatorias: Capítulo 10 (Fourier Analysis) del libro de Landau.

Semana 12 Implementación de solución numérica a ecuaciones diferenciales ordinarias, métodos de un paso.

Lecturas preparatorias: Capítulo 9 (ODEs) del libro de Landau.

Semana 13 Implementación de solución numérica a ecuaciones diferenciales ordinarias, métodos multipaso y sistemas autónomos.

Lecturas preparatorias: Capítulo 9 (ODEs) del libro de Landau.

Semana 14 Implementación de solución numérica a ecuaciones diferenciales parciales. Familias elíptica y parabólica.

Lecturas preparatorias: Capítulo 17 (PDEs) del libro de Landau.

Semana 15 Implementación de solución numérica a ecuaciones diferenciales parciales, familia hiperbólica.

Lecturas preparatorias: Capítulo 17 (PDEs) del libro de Landau.

IV Metodología

Durante algunas sesiones sincrónicas se realizará una explicación e implementación de los métodos computacionales por parte del profesor y en otras sesiones los estudiantes deberán entregar 1 o 2 ejercicios de manera individual (durante el horario de clase establecido por la Universidad). Algunos ejercicios que requieran más tiempo se asignarán por fuera del horario de clase. Todos los talleres que se realicen dentro y fuera de la clase se deberán entregar en SICUA, y tendrán el mismo porcentaje de nota, además, al final del semestre se eliminará la peor nota de taller. Adicionalmente, en la última semana de clases se realizará un examen final.

V Evaluación

El curso se evaluará de la siguiente forma

- Talleres dentro y fuera del horario clase 70 %
- Examen final 30 %

Todos los talleres y evaluaciones serán individuales y se entregarán a través de SICUA. No se aceptará la entrega de ningún taller o evaluación por fuera de esta plataforma.

Referencias

- [1] Scott Chacon, Ben Straub. Pro Git. <https://github.com/progit/progit2/releases/download/2.1.277/progit.pdf>, 2020.
- [2] Colin Morris. Python. <https://www.kaggle.com/learn/python>.
- [3] Documentación oficial de python. <https://docs.python.org/es/3/tutorial/index.html>.
- [4] John Hunter, Darren Dale, Eric Firing, Michael Droettboom. Documentación oficial de matplotlib. <https://matplotlib.org/3.3.3/Matplotlib.pdf>, 2020.
- [5] Aprendizaje matplotlib. <https://riptutorial.com/Download/matplotlib-es.pdf>, 2016.
- [6] Numpy user guide. <https://numpy.org/doc/stable/numpy-user.pdf>, 2016.