

# Computational Science: SC313101

## Spring 2019

January 8, 2019

### 1 Instructor

- อ. ชนพล ตั้งชูพงษ์ Office (6325E) Office Hours (xxxx)
- Class website  
[piazza.com/sc.kku.ac.th/spring2019/sc313101/](http://piazza.com/sc.kku.ac.th/spring2019/sc313101/)
- Facebook Group  
[www.facebook.com/groups/225385098397971](https://www.facebook.com/groups/225385098397971)
- Github for LAB documents:  
<https://github.com/thanaphon/ComputationalSC>

### 2 Introduction

ยินดีต้อนรับนักศึกษาทุกคนสู่คลาส Computational Science ในคลาสนี้ เนื้อหาจะครอบคลุมในส่วนของการใช้คอมพิวเตอร์เพื่อแก้ไขปัญหาทาง วิทยาศาสตร์(Science), เทคโนโลยี (Technology), วิศวกรรม (Engineering), และ คณิตศาสตร์ (Mathematics) โดยจะครอบคลุมถึงการทำ data analysis, visualization, simulation และ numerical analysis คลาสจะเริ่มโดย การรีวิวในส่วนของ Fundamental of programming โดยอาศัย Python และใช้ ปัญหาทางวิทยาศาสตร์ มาเป็นโจทย์ในการเรียนรู้ ซึ่งจะโฟกัสในส่วน of แอปพลิเคชัน เพื่อให้เห็นถึงการนำ ความรู้ที่ได้ไป บูรณาการกับปัญหาจริง

### 3 Goals

- ช่วยสร้างความมั่นใจในการเขียนโปรแกรมให้นักศึกษา โดยการพัฒนาโปรแกรมขนาดเล็ก
- แปลงปัญหาทางวิทยาศาสตร์ ให้มาอยู่สูตรของการคำนวณสำหรับเฟรมเวิร์คที่เหมาะสม
- เตรียมนักศึกษาได้รู้ถึงเทคนิคต่าง ๆ ที่ใช้ในวิธีการการคำนวณ เพื่อให้ นักศึกษาสามารถนำไปประยุกต์ใช้กับปัญหาเฉพาะที่นักศึกษาสนใจ
- สามารถออกแบบและทำการทดลองโดยอาศัย computer simulation

ซึ่งเราสามารถสรุป วัตถุประสงค์ข้างต้นเป็นหัวข้อที่นักศึกษาจะได้ เรียนรู้ดังต่อไปนี้

- เรียนรู้การเขียนโปรแกรม เพื่อนำเสนอการคำนวณ โดยใช้ Python และ Matlab (Octave) รวมถึงการเรียนรู้ใช้ โมดูล Python ต่างๆ
- เรียนรู้กระบวนการ ในการเขียนและดีบั๊กโปรแกรม
- เรียนรู้กระบวนการในการแปลงปัญหาจาก โจทย์หรือ problem statement ไปยัง framework ที่ใช้แก้ปัญห
- เรียนในส่วนของอัลกอริทึม พื้นฐานที่ใช้ในงานสำหรับวิทยาการคำนวณ
- เรียนรู้วิธีการในการใช้ computer simulation เพื่อหาคำตอบของปัญหาทางวิทยาศาสตร์
- เรียนรู้วิธีการสร้างแบบจำลอง (Modeling) และเข้าใจข้อมูลโดย อาศัยเครื่องมือทางการคำนวณ (computational tools)

### 4 References

- A Primer on Scientific Programming with Python

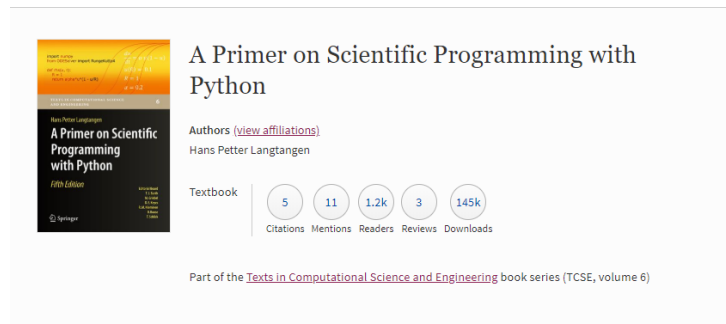


Figure 1:

ลิงค์ไปยัง free download ของสำนักพิมพ์ ซึ่งนักศึกษาสามารถ part หลังของหนังสือได้

- Free book อีกเล่มสำหรับ numerical excercises

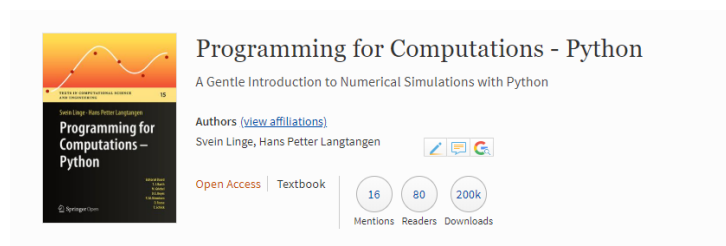


Figure 2:

## 5 Grading schemes

- 40% Homework
- 10% Class participation
- 30% Exam
- 20% Project

## 6 Topics คร่าวๆ ซึ่งอาจเปลี่ยนแปลงได้ ตามทิศทางความต้องการของนักศึกษา

- Motivation
  - Type of scientific problems
- Python programming
  - lambda function, array manipulation, numpy, sympy (symbolic computing)
  - เพื่อให้ศึกษาค้นเคยกับ build in operators และ modules ที่สำคัญ ๆ ของ Python ที่นิยมใช้ ในการแก้ปัญหาทางวิทยาศาสตร์
- Plotting graphs
  - matplotlib, scitools
- Selected classical Numerical topics
  - Floating Point Arithmetic: Issues and Limitations  
(  $0.1 + 0.1 + 0.1 == 0.3$  ) ?
  - Precision errors
  - Approximation functions:  $\sin x, \cos x, e^x$
  - Controlling approximation error
  - Root finding
    - Bisection search
    - Newton method
- Probability and Information Theory
  - เพื่อให้ศึกษาค้นเคยกับ Histogram และ สามารถ เปลี่ยน raw data ให้อยู่ในรูปแบบของ distributions สามารถนำข้อมูลที่กำหนดให้มาคำนวณหา information theory ของข้อมูล หรือหาความสัมพันธ์ ของข้อมูลอย่างง่าย
- Stochastic Methods
  - Random number
  - Monte Carlo method
  - Markov Chain
  - เพื่อให้ศึกษามีพื้นฐานในการสร้างแบบจำลองเพื่อสร้าง ฐานข้อมูล โดยอาศัย โมเดลแบบ non-deterministic

- System of linear equations

- Matrix and Vector

- Numerical method for linear system equation

- Least square method

- ให้นักศึกษาค้นเคยกับการเขียน โปรแกรมเพื่อจัดการกับข้อมูลที่เป็ Matrix และ Vectors ต่าง สามารถนำข้อมูลจาก section ก่อนหน้ามาวิเคราะห์ เพื่อทำแบบจำลอง ในรูปของ linear model

- Computational Graph (optional)

- Modeling (optional)

- Epidemic models

- Wave Equation