

Herramientas Computacionales para Científicos

HCC 2022

Programa detallado

Coordinadores: Manuel Carlevaro Ramiro Irastorza
✉ manuel.carlevaro@gmail.com ✉ rirastorza@iflysi.unlp.edu.ar
☎ +54 221 423 3283 int. 24 ☎ +54 221 423 3283 int. 24

Se dictarán dos clases semanales de dos horas cada una. Las clases totalizan 70 horas reloj. Durante el cursado se realizarán evaluaciones periódicas administradas por la plataforma Moodle, que contiene además todos los recursos didácticos. Para aprobar la cursada es necesario aprobar el 70 % de estas evaluaciones parciales y una asistencia mínima del 70 %.

Para aprobar el curso, los alumnos deberán presentar un Trabajo Final. El mismo podrá ser grupal (hasta tres alumnos) y comprende el desarrollo de un código computacional para resolver un problema a determinar (esto se definirá en función de los intereses de los alumnos), aplicando en su resolución una o varias de las herramientas computacionales desarrolladas en el curso. Para aprobar el TF los alumnos deberán presentar un informe escrito, el código computacional desarrollado, y hacer una defensa del mismo a través de un coloquio con los docentes del curso.

Docentes

MC:	Manuel Carlevaro	IFLySiB CONICET y UTN FRLP
TG:	Tomás Grigera	IFLySiB CONICET y UNLP
NG:	Nara Guisoni	CREG CONICET y UNLP
RI:	Ramiro Irastorza	IFLySiB CONICET y UTN FRLP
FL:	Federico Lotto	UNLP
AM:	Ariel Meyra	IFLySiB CONICET y UTN FRLP
SP:	Sebastián Pazos	LEICI CONICET y UNLP
LP:	Luis Pugnaroni	UNLPam CONICET
DR:	Diego Rosales	IFLySiB CONICET y UNLP
VP:	Victoria Vampa	UNLP
GZ:	Guillermo Zarragoicoechea	IFLySiB CONICET y UNLP

Programa

Clase	Docente	Tema	Detalles
1	MC	Introducción al curso	Presentación del curso. Hardware. Algoritmos. Compiladores e intérpretes. Sistemas operativos. Simulaciones.
2-3	TG	Introducción a Linux y Bash	Características generales, cuentas, archivos de configuración, variables de ambiente, permisos de archivos, comandos básicos y avanzados, procesos en batch, editores, <i>file system</i> . Elementos de la programación en BASH, redireccionamiento, pipes, estructuras de control y funciones. Comodines y expresiones regulares. <i>find</i> , <i>xargs</i> , <i>egrep</i> , <i>sort</i> , <i>join</i> y <i>gawk</i> .
4-6	DR	Introducción a Fortran	Tipos de datos, operaciones, arreglos, funciones y subrutinas intrínsecas, entrada/salida, decisiones y repeticiones. Funciones y subrutinas, tipos de argumentos, módulos.
7-12	MC	Introducción a C++	Programas, sentencias. Datos y variables. Tipos compuestos, arreglos, cadenas, estructuras. Sentencias condicionales y bucles. Punteros. Funciones. Objetos y clases. Entrada y salida.
13-16	MC	Introducción a Python	Intérprete interactivo. Scripts. Números y expresiones. Variables. Listas y tuplas. Cadenas. Diccionarios. Sentencias condicionales y bucles. Funciones, módulos. Excepciones. Introducción a Numpy, Scipy y Matplotlib.
17-18	TG	Introducción a Julia	Sintaxis básica. Uso interactivo (REPL), administrador de paquetes. Tipos de datos básicos: numéricos, cadenas de caracteres. Tipos compuestos: arreglos, tuplas, pares, diccionarios. Operadores aritméticos y lógicos. Operaciones entre arreglos. Control de flujo y funciones. Funciones anónimas (lambdas=). Tipos definidos por el usuario. Jerarquía de tipos. Sobrecarga dinámica de funciones. Entrada/salida. Llamada a programas externos, redirección, caños.
19	MC	Introducción al cálculo numérico	Sistemas de ecuaciones lineales. Acondicionamiento. Eliminación de Gauss-Jordan. Descomposición LU. Métodos iterativos. Gauss-Seidel. Uso de bibliotecas en Python, C++.
20	MC	Introducción al cálculo numérico	Integración y diferenciación numérica. Algoritmos elementales. Fórmulas de Newton-Cotes y cuadraturas gaussianas.
21	RI	Introducción al cálculo numérico	Generación de números pseudoaleatorios. Tipos de generadores. Congruenciales lineales. Mersenne Twister. Verificación, ensayos empíricos y teóricos, Dieharder.

Clase	Docente	Tema	Detalles
22	RI	Introducción al cálculo numérico	Raíces de ecuaciones trascendentes. Método de bisección. Métodos basados en interpolación. Newton-Raphson. Sistemas de ecuaciones.
21	RI	Introducción al cálculo numérico	Ecuaciones diferenciales ordinarias.
23	RI	Introducción al cálculo numérico	Problemas con valores de frontera.
24-25	VV	Introducción al cálculo numérico	Elementos finitos, conceptos generales.
26	GZ	Introducción a MC	Conceptos generales para sistemas continuos. Integración Monte Carlo, ensambles estadísticos, barostatos, coexistencia de fases.
27-28	NG	Introducción a MC	Conceptos generales para sistemas discretos. Muestreo simple, caminante aleatorio, muestreo de importancia. Balance detallado. Algoritmo de Metrópolis. Modelo de Ising. Condiciones de contorno.
29	GZ	Introducción a la dinámica molecular	Conceptos generales. Potenciales de interacción. Termostatos y barostatos. Algoritmos. Restricción de distancias y ángulos, condiciones de contorno. Análisis de resultados.
30	AM	Introducción a la dinámica molecular	Ejemplos de implementación de algoritmos de Verlet, Verlet con velocidades y salto de rana.
31	MC	Optimización estocástica	Algoritmo genético. Representación. Operadores selección, <i>crossover</i> y mutación. Modelo de islas. Algoritmo evolutivo. El problema de la mochila.
32-33	SP	Introducción al análisis espectral	Análisis espectral. Análisis tiempo-frecuencia. Transformada de Fourier. Conceptos fundamentales. Muestreo. Transformada discreta de Fourier.
34	FL	Redes neuronales	Perceptrón. Retropropagación de errores. <i>Deep learning</i> . Entrenamiento. Identificación de imágenes del conjunto MNIST.
35	LP	Optimización del cálculo	Ley de Amadhal. Conceptos básicos sobre RAM, cache, páginas de memoria, cache miss, etc. Anidado correcto de bucles, desenrollado de bucles, bucles por bloque, traslado de funciones al programa principal (<i>inlining</i>), eliminación de sub-expresiones repetidas. Breve introducción a los conceptos de cálculo en paralelo.
36	RI	Versionado de código	Sistemas de control de versiones. CVS, SVN, Git, Mercurial Bazaar. Git: flujo de trabajo, comandos básicos. Ramas.

Bibliografía

- [1] M.P. Allen y D.J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 2017.
- [2] Richard L. Burden, J. Douglas Faires y Annette M. Burden. *Numerical Analysis*. 9th ed. Cengage Learning, 2016.

- [3] Alan Chalmers. *Qué es esa cosa llamada ciencia*. Madrid: Siglo XXI de España, 2010.
- [4] Sujaul Chowdhury, Ponkog Kumar Das y Syed Badiuzzaman Faruque. *Numerical Solutions of Boundary Value Problems with Finite Difference Method*. 2053-2571. Morgan Claypool Publishers, 2018.
- [5] Alex Gezerlis. *Numerical Methods in Physics with Python*. Cambridge University Press, 2020.
- [6] David E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1989.
- [7] Harvey Gould, Jan Tobochnik y Wolfgang Christian. *An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems*. 3rd ed. Pearson Addison Wesley, 2007.
- [8] Marc Gregoire. *Professional C++*. Wrox, 2018.
- [9] John Guttag. *Introduction to computation and programming using Python: with application to computational modeling and understanding data*. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2021.
- [10] Thomas Haslwanter. *An Introduction to Statistics with Python*. Switzerland: Springer International Publishing, 2016.
- [11] Randy Haupt. *Practical genetic algorithms*. Hoboken, N.J: John Wiley, 2004.
- [12] Malvin H. Kalos y Paula A. Whitlock. *Monte Carlo Methods*. Weinheim: John Wiley & Sons, 2009.
- [13] Jaan Kiusalaas. *Numerical methods in engineering with Python 3*. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
- [14] Dirk Kroese, Thomas Taimre y Zdravko I. Botev. *Handbook of Monte Carlo Methods*. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2011.
- [15] H.P. Langtangen. *A Primer on Scientific Programming with Python*. Texts in Computational Science and Engineering. Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [16] Anders Logg, Kent-Andre Mardal y Garth N. Wells. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.
- [17] Melanie Mitchell. *An introduction to genetic algorithms*. Cambridge, Mass: MIT Press, 1996.
- [18] Stephen Prata. *C++ Primer Plus*. Developer's Library. Pearson Education, 2011.
- [19] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling y B.P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007.
- [20] Matthew W. Scroggs, Jørgen S. Dokken, Chris N. Richardson y Garth N. Wells. «Construction of arbitrary order finite element degree-of-freedom maps on polygonal and polyhedral cell meshes». to appear in ACM Transactions on Mathematical Software. 2022.
- [21] J. Stoer y R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Texts in Applied Mathematics. Springer-Verlag New York, 2002.
- [22] Gilbert Strang. *Linear Algebra and Its Applications, 4th Edition*. 4th. Brooks Cole, 2006.
- [23] Bjarne Stroustrup. *Programming: Principles and Practice Using C++*. Pearson Education, 2014.
- [24] Bjarne Stroustrup. *The C++ Programming Language*. Always learning. Addison-Wesley, 2013.
- [25] L.N. Trefethen y D. Bau. *Numerical Linear Algebra*. Other Titles in Applied Mathematics. Society for Industrial y Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), 1997.