



PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

Herramientas computacionales para científicos

VIGENTE DESDE EL AÑO 2018

CARRERA:

CARGA HORARIA SEMANAL: 4 horas

CARÁCTER:

PROFESORES A CARGO: Manuel Carlevaro – Ramiro Irastorza

CONTACTO: manuel@iflysib.unlp.edu.ar

CONTENIDO TEMÁTICO:

1. Introducción al hardware, compiladores e intérpretes. Lenguaje ensamblador, Python, C++, Fortran95. Conceptos generales sobre programación procedimental.
2. Programación orientada a objetos. Paradigma de la POO. Objetos y clases. Encapsulamiento, herencia y polimorfismo. Diagramas de clases.
3. Introducción a Python. Intérprete interactivo. Números y expresiones. Variables. Funciones. Módulos. Programas. Listas y tuplas. Cadenas. Diccionarios. Sentencias condicionales. Bucles. Abstracción, clases y objetos. Archivos. Excepciones.
4. Introducción a Fortran95. Tipos de datos, operaciones, arreglos, operaciones con arreglos. Funciones y subrutinas intrínsecas, manejo de cadenas de caracteres y entrada/salida (con y sin formato). Decisiones y repeticiones.
5. Introducción a C++. Programas. Sentencias. Funciones. Datos y variables. Tipos compuestos, arreglos, cadenas, estructuras. Sentencias condicionales y bucles. Objetos y clases. Archivos. La Standard Template Library.
6. Introducción al cálculo numérico. Raíces de ecuaciones trascendentes. Bisección. Método de la secante y Regula Falsi. Método de Brent. Newton-Raphson. Métodos globalmente convergentes para sistemas de ecuaciones. Sistemas de ecuaciones lineales. Gauss-Jordan. Descomposición LU. Descomposición QR. Integración y diferenciación. Algoritmos elementales. Integración de Romberg. Cuadraturas gaussianas y polinomios ortogonales. Ecuaciones diferenciales ordinarias. Métodos lineales de pasos múltiples. Método predictor-corrector. Métodos de Runge-Kutta. Generación de números pseudoaleatorios. Problemas con valores en la frontera.
7. Introducción a los elementos finitos. Formulación débil del problema elíptico, existencia y unicidad de la solución, enfoque de Rayleigh-Ritz. Triangulaciones, definición de elemento finito y propiedades, algunos tipos de elementos. Elementos de referencia, ensamblado, solvers, multigrillas y adaptividad. Ejemplo de conducción del calor usando elementos finitos.
8. 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. Ejemplos de implementación de algoritmos de Verlet, Verlet con velocidades y salto de rana.
9. Introducción a Monte Carlo. Conceptos generales para sistemas discretos, muestreo simple, caminante aleatorio, muestreo de importancia, balance detallado, algoritmo de Metrópolis, modelo de Ising, condiciones de contorno. Ejemplo de implementación del modelo de Ising. Conceptos generales para sistemas continuos, integración Monte Carlo, ensambles estadísticos, barostatos, coexistencia de fases. Ejemplo de implementación del modelo Lennard-Jones en MC.
10. Introducción a métodos evolutivos. Algoritmo genético. Representación. Operadores selección, crossover y mutación. Modelo de islas. Algoritmo evolutivo. Ejemplo de aplicación al análisis de espectros gama.
11. Introducción al análisis espectral. Transformada de Fourier. Conceptos fundamentales. Muestreo. Transformada discreta de Fourier. Análisis espectral. Análisis tiempo-frecuencia.
12. Optimización. 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 (inlining), eliminación de sub-expresiones repetidas, breve introducción a los conceptos de cálculo en paralelo.



BIBLIOGRAFÍA:

1. John Guttag. Introduction to computation and programming using Python: with application to understanding data. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2016.
2. Harvey Gould, Jan Tobochnik y Wolfgang Christian. An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems.3rd ed.Pearson Addison Wesley, 2007.
3. M.P. Allen y D.J. Tildesley.Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press, 2017.
4. Bjarne Stroustrup.Programming: Principles and Practice Using C++. Pearson Education, 2014.
5. Stoer y R. Bulirsch.Introduction to Numerical Analysis. Texts in Applied Mathematics. Springer-Verlag New York, 2002.
6. Randy Haupt. Practical genetic algorithms.Hoboken, N.J: John Wiley, 2004.

