



Nombre del Curso			
Herramientas Computacionales para Científicos			
<b>Anterior nombre:</b> Introducción a programación, cálculo numérico y simulación para científicos			
Profesor Responsable (indicando las horas que participa en el dictado de clases)			
Luis Ariel Pugnaroni (22 horas) y Carlos Manuel Carlevaro (24 horas)			
Docentes Participantes (indicando las horas que participa en el dictado de clases)			
Tomás S. Grigera (4 horas), Ramiro Irastorza (4 horas), Paulo Porta (4 horas), Carlos Muravchik (4 horas), Guillermo Zarragoicoechea (4 horas), Nara Guisoni (4 horas)			
Duración Total (en horas)		70 horas	
Modalidad (Teórico, teórico-práctico, seminario, etc)		Teórico-práctico más seminarios especializados	
Tipo de evaluación prevista		Examen final	
Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado.			
Este curso cubre con adecuada profundidad gran parte de las técnicas numéricas y de simulación usadas en el modelado de diversos sistemas. El curso resulta de especial ayuda a estudiantes que inician su doctorado y requieren familiarizarse con estas técnicas desde los aspectos conceptuales hasta los operacionales. La mayoría de los contenidos cubiertos no son impartidos en carreras de grado.			
Fecha de dictado	2do semestre	Cupo de alumnos	35 (treinta y cinco)
Exigencias y requisitos de inscripción			
Ser graduado de carreras de ciencias exactas, ingeniería, informática o ciencias naturales			
Arancelamiento			
NO	<input checked="" type="checkbox"/>	SÍ	<input type="checkbox"/>
Montos	No aplica		
Destino de los fondos	No aplica		
Mecanismo de pago	No aplica		
Breve resumen de los objetivos y contenidos			

*[Signature]*  
M. Carlevaro

*[Signature]*  
LA Pugnaroni



**Objetivos:** Brindar al estudiante la base técnica y operacional para el trabajo de programación, cálculo numérico y simulación requerido en diversas áreas de la ciencia. Introducir al estudiante a variados métodos de modelización, de cálculo numérico y simulación.

**Contenidos:**

**Programación procedimental y orientada a objetos:** Fortran95, C++, Python, "scripting", optimización de programas seriales, e introducción a la programación en paralelo.

**Cálculo numérico:** Ecuaciones trascendentes, sistemas lineales, integración, diferenciación, ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, minimización, transformadas de Fourier, y método de elementos finitos.

**Simulación:** Monte Carlo de sistemas desordenados, Monte Carlo de sistemas en redes, dinámica molecular, dinámica browniana, métodos de primeros principios, y algoritmos evolutivos.

Contacto con el responsable			
Dirección	IFLYSIB, Calle 59 Nro 789, (1900) La Plata		
Teléfono	0221 4233283 int 24	Fax	0221 4257317
Correo electrónico	manuel@iflysib.unlp.edu.ar, luis.pugnaloni@frlp.utn.edu.ar		

1	MC	Introducción a Python	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
2	MC	Introducción a Python	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
3	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
4	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
5	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
6	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
7	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
8	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
9	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
10	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
11	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
12	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.
13	MC	Introducción a C++	Tipos de datos, operadores, asignaciones, expresiones, estructuras de control, funciones, módulos, programación orientada a objetos.

*Manuel* *Luis*



Programa detallado de actividades del curso de postgrado:  
**Herramientas computacionales para científicos**

Se dictarán 2 (dos) clases semanales de dos horas cada una más un taller con especialistas en aplicaciones de las técnicas desarrolladas en el curso. Las actividades totalizan 70 horas reloj. Las prácticas se desarrollarán en horario de clases.

**Docentes:**

- MC: Manuel Carlevaro (IFLYSIB, CONICET, UNLP)
- TG: Tomás Grigera (IFLYSIB, CONICET, UNLP)
- RI: Ramiro Irastorza (IFLYSIB, CONICET, UNLP)
- PP: Paulo Porta (Rein Chemie SA)
- NG: Nara Guisoni (IFLYSIB, CONICET, UNLP)
- LAP: Luis Ariel Pugnaroni (UTN-FRLP, CONICET)
- CM: Carlos Muravchik (LEICI, UNLP, CONICET)
- GZ: Guillermo Zarragoicoechea (IFLYSIB, CIC, UNLP)

Clase	Docente	Tema	Detalles
1	LAP	Introducción al hardware, compiladores e intérpretes	Lenguaje ensamblador, Python, C++, Fortran95. Conceptos generales sobre programación procedimental.
2	MC	Programación orientada a objetos	Paradigma de la POO. Objetos y clases. Encapsulamiento, herencia y polimorfismo. Diagramas de clases.
3	MC	Introducción a Python	Intérprete interactivo. Números y expresiones. Variables. Funciones. Módulos. Programas.
4	MC	Introducción a Python	Listas y tuplas. Cadenas. Diccionarios. Sentencias condicionales. Bucles. Abstracción, clases y objetos. Archivos. Excepciones.
5	LAP	Introducción a Fortran95	Tipos de datos, operaciones, arreglos, operaciones con arreglos.
6	LAP	Introducción a Fortran95	Funciones y subrutinas intrínsecas, manejo de cadenas de caracteres y entrada/salida (con y sin formato).
7	LAP	Introducción a Fortran95	Decisiones y repeticiones.
8	LAP	Introducción a Fortran95	Funciones y subrutinas, tipos de argumentos, módulos.
9	MC	Introducción a C++	Programas. Sentencias. Funciones. Datos y variables. Tipos compuestos, arreglos, cadenas, estructuras. Sentencias condicionales y bucles.
10	MC	Introducción a C++	Objetos y clases.
11	MC	Introducción a C++	Archivos. La Standard Template Library
12	LAP	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.
13	MC	Introducción al cálculo numérico	Sistemas de ecuaciones lineales. Gauss-Jordan. Descomposición LU. Descomposición QR.



14	MC	Introducción al cálculo numérico	Integración y diferenciación. Algoritmos elementales. Integración de Romberg. Cuadraturas gaussianas y polinomios ortogonales.
15	MC	Introducción al cálculo numérico	Ecuaciones diferenciales ordinarias. Métodos lineales de pasos múltiples. Método predictor-corrector. Métodos de Runge-Kutta.
16	RI	Introducción al cálculo numérico	Generación de números pseudoaleatorios.
17	LAP	Introducción al cálculo numérico	Problemas con valores en la frontera.
18	PP	Introducción al cálculo numérico	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.
19	PP	Introducción al cálculo numérico	Ejemplo de conducción del calor usando elementos finitos.
20	GZ	Introducción a dinámica molecular	Conceptos generales, potenciales de interacción, termostatos y barostatos, algoritmos, restricción de distancias y ángulos, condiciones de contorno, análisis de resultados.
21	LAP	Introducción a dinámica molecular	Ejemplos de implementación de algoritmos de Verlet, Verlet con velocidades y salto de rana.
22	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.
23	NG	Introducción a MC	Ejemplo de implementación del modelo de Ising.
24	GZ	Introducción a MC	Conceptos generales para sistemas continuos, integración Monte Carlo, ensambles estadísticos, barostatos, coexistencia de fases.
25	LAP	Introducción a MC	Ejemplo de implementación del modelo Lennard-Jones en MC.
26	LAP	Introducción a dinámica browniana	Conceptos generales y ejemplo de implementación para esferas blandas.
27	LAP	Simulación de sistemas fuera del equilibrio	Pequeñas deformaciones: expansión-compresión, cizalla. Ejemplos en dinámica molecular y dinámica browniana.
28	MC	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.
29	CM	Introducción al análisis espectral	Transformada de Fourier. Conceptos fundamentales. Muestreo. Transformada discreta de Fourier.
30	CM	Introducción al análisis espectral	Análisis espectral. Análisis tiempo-frecuencia.
31	LAP	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.
32	MC	Introducción a Linux	Características generales, cuentas, archivos de configuración, variables de ambiente, permisos de archivos, comandos básicos (cd, ls, mkdir, rm, mv, cp, ps, kill, df, su, id, more, du, man, etc.), comandos avanzados (cat, grep, find, tar, gzip, top, etc.), procesos en batch (nohup, at, renice), editores (vi), file system.
33	TG	El concepto de herramientas en Unix	Elementos de programación en bash (scripting): redireccionamiento, pipes, estructuras de control, funciones. Comodines y expresiones regulares. find, xargs, egrep, sort, join y gawk.
34	Varios 4 hs	Minitaller	Minitaller sobre aplicaciones de cálculo numérico y simulación con investigadores invitados.

### Bibliografía

1. M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.
2. B. D. Hahn, Introduction to Fortran 90 for Scientists and Engineers, Cambridge University Press, 1993.
3. B. Stroustrup, The C++ programming Language, 3 Edition, Addison-Wesley Longman Publishing Co., Boston, 1997.
4. T. S. Grigera, glsim: A general library for numerical simulation, Computer Physics Communications, v. 182, pp. 2122, 2011.
5. D. Frenkel, B. Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, Academic Press, Cornwall, 2002.
6. K. Binder, Monte Carlo simulation in statistical physics, Springer Verlag, Berlin, 1992.
7. M. Lutz, Programming Python, O'Reilly, Sebastopol, 2011
8. J. D. Sterman, Business Dynamics: Systems Thinking and Modeling for a Complex World, McGraw-Hill, Boston, 2000.
9. J. Nakamura, Applied Numerical Methods with Software, Prentice Hall, Upper Saddle River, 1990.
10. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical recipes: The art of scientific computing, 2nd Edition, Cambridge University, Cambridge, 1992.
11. R. W. Hamming, Numerical methods for scientists and engineers, 2 Edición, McGraw-Hill, Tokyo, 1973.
12. S. C. Brenner, L. R. Scott, The mathematical theory of finite element methods, 3Edición, Springer, Berlin, 2007
13. I. N. Sneddon, Fourier Transforms, Dover, Mineola, 1995.