

Universidad de Puerto Rico, Recinto de Río Piedras
Facultad de Ciencias Naturales, Departamento de Física

Título: Tópicos Especiales en Física I: Introduction to Scientific Computing

Código: PHYS 4041

Créditos: 3

Profesor: Julian Velev

Office: Natural Sciences II, C-346

Email: julian.velev@upr.edu

Hours: Monday, Wednesday 8:30-9:50; C-311

Office hours: By appointment

Prerequisites: Sufficient preparation in calculus and physics to understand the examples. Basic computer literacy such as text editing, administering the computing environment (installing applications and libraries), executing code from the command prompt, etc. Access to a computer where the Python programming environment and libraries could be installed (preferably a laptop). It is the students' responsibility to setup their own working Python environment.

Course description: The goal of this course is to develop basic programming proficiency for science majors. In class the students will learn the main programming paradigms: data representation (data types and data structures), program control (branching and loops); input and output (files and visualization); error handling (exceptions); and object-oriented programming (classes).

This will be done in the context of examples taken from mathematics, physics, biology, and economics. The unifying theme of the examples is that they are statistical in nature. They include numerical methods such as Monte Carlo integration, Monte Carlo simulations of thermodynamic equilibrium, game theory and evolutionary game theory. The students will immediately apply the concepts by implementing the examples in class and developing applications at home as homework.

The course will use the Python programming language because of its remarkable power coupled with very clean and concise syntax. Python shortens the learning curve allowing the students to quickly progress to the stage of producing meaningful applications. At the same time is a very good foundation for those who will continue to use other programming languages such as C++, Java, and Fortran.

Textbooks:

(1) H. P. Langtangen, *A primer on scientific programming with Python*, 5nd edition, (Springer, 2016), ISBN 978-3662498866

(2) H. P. Langtangen, *Python scripting for computational science*, 3rd edition, (Springer, 2009), ISBN 978-3540739159

Tentative schedule:

Week	Title	Reading
1	Preliminaries Setup working python environment	
2	Introduction: General introduction to computing <i>Hands on: Setup the Python environment. First program</i>	1.1,2
3	Data structures: Variables. Operators. Standard data types. Math library <i>Hands on: Celsius-Fahrenheit conversion; Ball thrown vertically</i>	1.1,3,6; 6.3
4	Program elements: Branching. Loops <i>Hands on: Calculation of functions using Taylor expansions</i> Exam 1: Sep 29 (Mon)	3.2; 2.1
5	Data structures: Tuples and lists <i>Hands on: Celsius-Fahrenheit (table)</i>	2.2-5; 6.2
6	Data structures: Arrays, strings, and dictionaries. NumPy library <i>Hands on: Polynomial evaluation</i>	5.1,2,5,6
7	Program elements: Functions. Modules <i>Hands on: Numerical differentiation. Interest rates.</i> Exam 2: Oct 20 (Mon)	1.4; 3.1; 4.4
8	Input/Output: Standard input/output. Command line. Files <i>Hands on: Stock returns</i>	6.1,5; 5.3,4
9	Input/Output: Visualization. Matplotlib library <i>Hands on: Normal distribution. Stock returns (plots)</i>	
10	Error handling: Exceptions <i>Hands on:</i> Exam 3: Nov 17 (Mon)	4.3
11	Numerical methods: Random numbers <i>Hands on: Uniform and normal distribution histogram</i>	8.1-3
12	Applications: Monte Carlo sampling <i>Hands on: Numerical integration. Monte Carlo integration</i>	8.5
13	Applications: Metropolis Monte Carlo. Importance sampling <i>Hands on: Ising model</i>	8.6,7
14	Applications: Game theory. Evolutionary game theory <i>Hands on: Cournot duopoly. Hawk-dove game</i> Exam 4: Dec 10 (Wed)	

Grading: The grade will be based on four **in class** exams plus a **course project**, each contributing 20% of the grade. Collaboration on the course project is not allowed unless the project is explicitly assigned to a group. The course project will require the student to produce working code and presentation. The project should be submitted in a report form with introduction, design, implementation, and results sections. The grading scheme is A, B, C, D, F.

University policies:

RIGHTS OF STUDENTS WITH DISABILITIES

UPR complies with all Federal and State Laws and regulations regarding discrimination, including the Americans with Disabilities Act 1990 (ADA) and the Commonwealth of Puerto Rico Law 51. Students receiving services through Rehabilitation Vocational must contact the professor at the beginning of the semester in order to plan for a reasonable accommodation and any required support equipment according to the recommendations given by the Oficina de Asuntos para Personas con Impedimentos (OAPI) of the Dean of Students. Likewise, students with special need that require some type of accommodation must contact the professor at the beginning of the semester.

INTEGRIDAD ACADEMICA

La Universidad de Puerto Rico promueve los más altos estándares de integridad académica y científica. El artículo 6.2 del Reglamento General de Estudiantes de la UPR (Certificación Núm. 13, 2009-2010, de la Junta de Síndicos) establece que "la deshonestidad académica incluye, pero no se limita a: acciones fraudulentas, la obtención de notas o grados académicos valiéndose de falsas o fraudulentas simulaciones, copiar total o parcialmente la labor académica de otra persona, plagiar total o parcialmente el trabajo de otra persona, copiar total o parcialmente las respuestas de otra persona a las preguntas de un examen, haciendo o consiguiendo que otro tome en su nombre cualquier prueba o examen oral o escrito, así como la ayuda o facilitación para que otra persona incurra en la referida conducta". Cualquiera de estas acciones estará sujeta a sanciones disciplinarias en conformidad con el procedimiento disciplinario establecido en el Reglamento General de Estudiantes de la UPR vigente.

INTELIGENCIA ARTIFICIAL

En estos cursos, a menos que el silabo específicamente lo indique, todas las técnicas o los instrumentos para la evaluación del aprendizaje deberán completarse sin asistencia de herramientas de Inteligencia Artificial. El objetivo es garantizar que el estudiante demuestre sus conocimientos, destrezas, habilidades y comprensión fundamentales en un entorno controlado. Cualquier uso de la IA en las técnicas o los instrumentos para la evaluación del aprendizaje será considerado una violación de las normas de integridad académica.

ACOMODO RAZONABLE

La Universidad de Puerto Rico cumple con todas las leyes federales, estatales y reglamentos concernientes a discriminación, incluyendo "The American Disabilities Act" (Ley ADA) y la Ley 51 del Estado Libre Asociado de Puerto Rico. Los estudiantes que reciban servicios de rehabilitación vocational deben comunicarse con el (la) profesor(a) al principio del semestre para planificar el acomodo razonable y equipo de apoyo necesario conforme a las recomendaciones de la Oficina de Asuntos para las Personas con Impedimento (OAPI) del Decanato de Estudiantes. Una solicitud de acomodo razonable no exime al estudiante de cumplir con los requisitos académicos del curso.

HOSTIGAMIENTO SEXUAL

La Universidad de Puerto Rico prohíbe el discriminación por razón de sexo y género en todas sus modalidades, incluyendo el hostigamiento sexual. Según la Política institucional contra el Hostigamiento Sexual en la Universidad de Puerto Rico, Certificación Núm. 130, 2014-2015 de la Junta de Gobierno, si un estudiante está siendo o fue afectado por conductas relacionadas a hostigamiento sexual, puede acudir ante la Oficina de la Procuraduría Estudiantil, el Decanato de Estudiantes o la Coordinadora de Cumplimiento con Título IX para orientación y/o presentar una queja.