

Python for Scientists (C004212)

Cursusomvang *(nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)*

Studiepunten 5.0 **Studietijd 150 u**

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 1)	Engels	Gent	hoorcollege werkcollege
----------------	--------	------	----------------------------

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Leliaert, Jonathan	WE04	Verantwoordelijk lesgever
Verstraelen, Toon	WE05	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	stptn	aanbodsessie
Bachelor of Science in de fysica en de sterrenkunde	5	A
Master of Science in Biomedical Sciences	5	A
Uitwisselingsprogramma faculteit Wetenschappen (niveau Bachelor)	5	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in de fysica en de sterrenkunde	5	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Physics and Astronomy	5	A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

Computationele fysica en sterrenkunde, numerieke methoden.

Situering

Dit opleidingsonderdeel behoort tot de leerlijn "Computervaardigheden" in de Bacheloropleiding Fysica en Sterrenkunde.

Computationele methoden zijn de "bicycles of the mind": computationele algoritmen bieden nieuwe mogelijkheden in experimentele opstellingen of in simulaties van theoretische modellen, die niet haalbaar zijn met eenvoudige manuele berekeningen, een rekenmachine of een spreadsheet. Hierdoor zijn programmeervaardigheden en het creatief gebruik van softwarebibliotheken belangrijke vaardigheden voor studenten in de opleiding Fysica en Sterrenkunde. Deze vaardigheden kunnen een extra dimensie geven aan andere vakken in de opleiding en zijn ook sterk gewaardeerde troeven op de arbeidsmarkt. Deze cursus biedt de theoretische basiskennis van numerieke algoritmen en hun relevantie voor fysica en sterrenkunde. Hands-on sessies en projecten tijdens het semester vullen de theorie aan zodat studenten doelgericht computationele methoden kunnen aanwenden. Deze cursus beoogt een brug te slaan tussen de basiscursus programmeren (1ste bachelor) en het vak Computational Physics (master).

Inhoud

Theorie:

- 1 Numerieke beperkingen: precisie (representatie van getallen met drijvende komma), cpu-snelheid (timing van algoritmen) en geheugen (profilering).
- 2 Numerieke basisbegrippen in Python: lijsten versus arrays, wiskundige array-bewerkingen (elementair en contracties), andere bewerkingen (sorteren, snijden, ...).
- 3 Basisvisualisatie met 2D-afbeeldingen: curven, staafdiagrammen, spreidingsplots, legenda's en assen, histogrammen, contourplots, heatmaps.
- 4 Professionele programmeerpraktijken: broncode revisies, kwaliteitscontrole
- 5 Numerieke lineaire algebra: decomposities (QR, LU, Eigen, SVD) en oplossen van lineaire problemen.
- 6 Interpolatie en gegevensmodellering: multidimensionale lineaire regressie, kubische splines,

- Chebyshev interpolatie en regularisatie, Kriging en kernel-regressie.
- 7 Numerieke optimalisatie: samenvatting van terminologie (stationaire punten, minima, zadelpunten, maxima), 1D en multidimensionaal, convexiteit, gradiënt-algoritmen (SD, CG, QN), gradiënt-vrije algoritmen.
- 8 Eindig differenzen. Toepassing op het oplossen van ODE's.
- 9 Fast-fourier-transformatie.
- 10 (Markov-Chain) Monte Carlo-bemonstering, belang van priors.
- 11 Geavanceerde numerieke (efficiëntie) onderwerpen: vectorisatie, computergrafieken, just-in-time compilatie, ...

Begincompetenties

- 1 Basiskennis van programmeren in Python: ingebouwde datatypes, flow control, functies, klassen, modules importeren uit de standaardbibliotheek.
- 2 Basiswiskunde en -fysica: klassieke mechanica, elektromagnetisme, calculus, lineaire algebra

Eindcompetenties

- 1 Begrip van numerieke beperkingen: precisie en beschikbare bronnen (cpu-tijd, geheugen, ...).
- 2 Begrip van werkingsprincipes, sterke punten en beperkingen van computeralgoritmes die worden gebruikt in computationele fysica en sterrenkunde. (Zie cursusinhoud voor meer details.)
- 3 Oplossen van elementaire rekenproblemen door middel van programmeren in Python, voornamelijk met behulp van NumPy en SciPy.
- 4 Kennis van beschikbare wetenschappelijke programmeerbibliotheken en het vinden van vereiste functies of klassen in hun documentatie.
- 5 Verwerking van invoergegevens afkomstig van verschillende bronnen (CSV, TXT, HDF5, NPZ) en uitvoer van ruwe data in dezelfde formaten.
- 6 Maken van inzichtelijke visualisaties van invoergegevens of rekenresultaten (2D-plotten).
- 7 Installatie van een Python-ontwikkelomgeving op elk gewenst besturingssysteem.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk mits gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege, Practicum

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Oefeningen: onder begeleiding in kleine groepen

Studiemateriaal

Type: Handboek

Naam: Scientific Computing - An introductory survey (revised second edition)
 Richtprijs: € 120
 Optioneel: ja
 Taal : Engels
 Auteur : Michael T. Heath
 ISBN : 978-1-61197-558-1
 Aantal pagina's : 587
 Beschikbaar in de bibliotheek : Ja

Type: Software

Naam: Jupyter Notebooks met leerstof theorie en uitgewerkte voorbeelden
 Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding
 Optioneel: nee
 Beschikbaar op Athena : Nee
 Online beschikbaar : Ja

Referenties

- Sterk aanbevolen: Scientific Computing, An Introductory Survey, Revised Second Edition – Michael T. Heath
- Andere nuttige naslagwerken: Numerical Recipes in Python

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Website (Ufora) met aanvullend materiaal en referenties beschikbaar. Voldoende gelegenheid om te vragen te stellen, zowel tijdens lessen als via e-mail.

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie open boek

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is niet mogelijk

Toelichtingen bij de evaluatievormen

- Theorie-examen met gesloten boek (periodegebonden evaluatie): mondeling examen met schriftelijke voorbereiding. Dit examen richt zich voornamelijk op punten 1 en 2 van het eindcompetenties. Evaluatie richt zich hoofdzakelijk op inzicht in deze onderwerpen, minder op reproductie van theorie.
- Open boek oefeningen examen (periodegebonden evaluatie): Computer-oefeningen waarbij de theorie toegepast wordt in concrete vraagstukken die opgelost mogen worden met behulp van het lesmateriaal en documentatie van de softwarebibliotheken die in de cursus aan bod kwamen.
- Permanente evaluatie: actieve deelname aan de projecten tijdens het semester, het tonen van creatieve input en constructieve feedback bij peer assessment.

Eindscoreberekening

- 50% theorie (periodegebonden evaluatie)
- 30% openboek oefeningen examen
- 20% actieve participatie in projecten (niet-periodegebonden evaluatie).
- De examinerator kan studenten die zich onttrekken aan de periodegebonden en/of niet-periodegebonden evaluaties niet-geslaagd verklaren