

بسمه تعالی

درس فیزیک محاسباتی مقطع کارشناسی ارشد نیمسال اول ۸۹-۹۰

زمان یک شنبه‌ها ساعت ۱۴:۳۰ تا ۱۶:۳۰ اتاق ۴۰۳

ارائه دهنده: سیدمحمدصادق موحد

نمره درس شامل حل تمرینات ۱۰ نمره، ۶ نمره امتحان پایانی و ۴ نمره پروژه می‌باشد. نوع پروژه به صورت توافقی تعیین خواهد شد.

تحويل تمرینات بایستی به صورت زیر باشد

الف: یک پوشه که عنوان آن نام دانشجو و شماره سری تمرین بوده و شامل موارد زیر باشد:

ب: متن برنامه به یکی از زبانهای FORTRAN یا C++ که در هر بخش شامل توضیحات مربوطه باشد

ج: شکلها بایستی به فرمت Jpeg یا ps یا eps و یا pdf باشد. نمونه‌های دیگر پذیرفته نخواهد شد.

وسایل مورد نیاز

الف: یک سیستم عامل به روز مانند Windows XP یا Linux Mandriva یا Macintosh (OS X) که دارای اجرا کننده Fortran 90 یا C++ باشد. استفاده از رایانه شخصی قویاً توصیه می‌شود.

ب: یک نرم افزار جهت رسم نتایج مانند Gnuplot یا IDL یا Tecplot و یا هر نرم افزاری که با آن آشنایی اولیه‌ای دارید توصیه می‌شود.

برخی از مهمترین مراجع

- ۱- دست نوشته های درسی خودم که در منزلگاه اینجانپ قابل دریافت است.
- ۲- کتاب آشنایی با روشهای شبیه سازی در فیزیک، مولف مهدی نیک‌عمل و همکاران
- 3- “Computational Physics”, Nicholas J. Giordano.
- 4- “Computer simulation Methods in theoretical physics”, Dieter W. Heermann.
- 5- Buffalo University home page for computational physics,
<http://www.physics.buffalo.edu/phy410-505-2009/>
<http://www.physics.buffalo.edu/phy411-506-2009/>

- 1) Errors and Error estimations
- 2) Correlation and probability density function
- 3) PDF transformation and kernel method
- 4) Differential equations
 - Numerical methods for solution (Euler, RKf45, ...)
 - Partial differential equations (Diffusion)
 - Second order differential equation
 - Systems of differential equations
 - Boundary value problem (Electric potential, ...)
- 5) Numerical integration
 - Infinite and semi-infinite integration
 - Integration with singularity in the integrand range
 - Multi-dimensional integration
- 6) Random walk in general case
 - Fractional Brownian motion
 - Fractional Gaussian noise Numerical methods for solution (Euler, RKf45, ...)
 - Partial differential equations (Diffusion)
 - Second order differential equation
 - Systems of differential equations
- 7) Power spectrum
 - Fourier transformation
 - Fast Fourier transformation (FFT)
 - Comments on limitation of power spectrum in digitalized measurement (Trend, Alias, ...)
 - Construction a Gaussian stochastic series with arbitrary correlation function
 - Legendre transformation (Random field on sphere)
 - Quantum wave packets
 - Fourier detrended fluctuation analysis (High pass filter)
 - Singular value decomposition as a filter
- 8) Wavelet and curvelet
- 9) Chaos
 - Phase diagram and mapping
 - Chaos in double pendulum
- 10) Stochastic computation
 - Monte Carlo method in general
 - Variational Monte Carlo method
- 11) Bayesian statistics
 - Data modeling and merit function
 - Likelihood analysis, prior distribution
 - Best fit parameters and confidence intervals

- Goodness of fit
- Fisher forecast analysis
- Hamiltonian Monte Carlo analysis
- 12) Ising model (Phase transition)
- 13) Percolation (Phase transition)
- Contour finding algorithm (Hoshen-Kopleman)
- 14) Band-gap structure in periodic solids
- 15) Genetic algorithm for optimization
- 16) Molecular dynamics

برنامه کلاسی

موضوع	تاریخ
Errors and error estimation	۸۹/۷/۴
PDF and correlation function	
PDF transformation and data generation	۸۹/۷/۱۱
Differential and integral calculations (I)	۸۹/۷/۱۸
Differential and integral calculations (II)	۸۹/۷/۲۵
Power spectrum and FFT methods	۸۹/۸/۲
Monte Carlo and Hamiltonian Monte Carlo method (I)	۸۹/۸/۹
Monte Carlo and Hamiltonian Monte Carlo method (II)	۸۹/۸/۱۶
Optimization and parameter estimation (Bayesian analysis and Markov chain Monte Carlo method MCMC) (I)	۸۹/۸/۲۳
Optimization and parameter estimation (Bayesian analysis and Markov chain Monte Carlo method MCMC) (II)	۸۹/۸/۳۰
Molecular dynamics (I)	۸۹/۹/۷
Molecular dynamics (II)	۸۹/۹/۱۴
Genetic algorithm	۸۹/۹/۲۱
Wavelet and curvelet transform I	۸۹/۹/۲۸
Wavelet and curvelet transform I	۸۹/۱۰/۵
Summary and conclusion	۸۹/۱۰/۱۲