باسمه تعالی

درس فیزیک محاسباتی نیم‌سال دوم سال تحصیلی ۹۷-۹۶

ارائه دهنده: سیدمحمدصادق موحد شنبه و دوشنبه ساعت ۱۷-۱۵:۳۰

استاد حل تمرین: بابک اسعدی ساعت

۱) نمره درس شامل حل تمرینات ۱۲ نمره، ۴ نمره امتحان پایانی و ۴ نمره پروژه محاسباتی و ۱ نمره کوییزهای کلاسی است.

۲) تحویل 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، C++ یا بهره گیری از Matlab, Mathematica, Maple، Python، R که در هر بخش شامل توضیحات مربوطه باشد

ج: شکلها بایستی به فرمت Jpeg یا ps یا eps و یا pdf باشد.

۳) وسایل مورد نیاز

الف: یک سیستم عامل به روز مانند Windowsیا Linux یا Macintosh (OS X) که دارای اجرا کننده Fortran 90 یا C++ و دیگر نرم‌افزارهای مورد نیاز مانند matlab و VPython باشد. استفاده از رایانه شخصی قویاً توصیه می‌شود.

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

۴) با توجه به اهمیت پروژه‌های انجام شده باید گزارش مختصر چارچوب یک تحقیق را داشته باشد.

۵) برخی از مهمترین سرفصلها

* مقدمات سیستم‌های عامل مانند لینوکس و یونیکس، نوشتن Bash script
* مدلسازی داده ها، انتشارگر خطا(Data modeling and Error propagators)
* محاسبه تابع توزیع و تابع همبستگی، تبدیلات عددی بین توابع توزیع، تولید داده‌های تصادفی با تابع توزیع گوسی و دلخواه
* تحلیل فوریه گسسته و الگوریتمهای آن، محاسبه طیف توان
* روشهای عددی حل معادلات دیفرانسیل با شرایط اولیه و مقادیر مرزی، روشهای انتگرال‌گیری عددی،
* شبیه سازی فرآیندهای تصادفی (معادله لانژون، ولگشت تصادفی و ..)
* فرآیندهای آشوبی و شبیه سازی و تحلیل آنها
* حل معادلات ویژه‌مقداری و قطری سازی ماتریسها
* روش تفاضل محدود در حل معادلات دیفرانسیل
* شبیه‌سازی مونت کارلو (کاربردها در سیستم‌های آماری و مدلسازی داده‌ها، انتگرال گیری، مونت کارلو وردشی، مونت کارلو همیلتونی، زنجیره مارکوف مونت کارلو)
* گذارفاز در شبکه‌های اسپینی مانند مدل آیزینگ، تراوش
* شبیه سازی دینامیک مولکولی (گازها و مواد دانه‌ای)
* تحلیل درست نمایی و ماتریس فیشر (Likelihood analysis and Fisher matrix)
* مقدمات الگوریتم ژنتیک
* یادگیری ماشین و مقدمات تحلیل داده‌های بزرگ
* لازم به توضیح است که تمرکز بر روی برخی از موارد فوق بنا به گرایش دانشجویان می‌تواند تغییر کند. برای مثال برای دانشجویان گرایش ماده چگال تمرکز بر روی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و البته محاسبات نوار انرژی مانند روش هارتری-فاک، نظریه تابعی چگالی و غیره می‌تواند به جای بحث نظریه آشوب و فراکتالها و بخشی از مدل کردن داده‌ها مورد تاکید قرار گیرد.

۶) برخی از مهمترین مراجع

۱- دست نوشته های درسی خودم که در منزلگاه اینجانب با آدرس

http://facultymembers.sbu.ac.ir/movahed

قابل دریافت است.

۲- کتاب آشنایی با روشهای شبیه سازی در فیزیک، مولف مهدی نیک‌عمل و همکاران

3- Nicholas J. Giordano, "*Computational Physics*".
4- Dieter W. Hermann, "*Computer simulation Methods in theoretical physics*".
5- Buffalo University home page for computational physics, http://www.physics.buffalo.edu/phy410-505-2009/
6- http://www.physics.buffalo.edu/phy411-506-2009/
7- http://www.handsonresearch.org/
8- Tao Pang , "*An Introduction to Computational Physics*", Cambridge University Press (2006)
9- Simon Sirca and Martin Horvat, "*Computational methods for physicists _ compendium for students*", Springer (2013)

10- Harvey Gould, Jan Tobochnik and Wolfgang Christian, "*An introduction to computer simulation methods: Applications to physical systems*", Addison-Wesley (2007)
11- Rubin H. Landau, Manuel J. Paez and Cristian C. Bordeianu, "Computationa; Physics" (2011).
12- http://www.aghamousa.com/data-science-books/
13- http://www.deeplearningbook.org/lecture_slides.html

۷) برخی از مهم‌ترین موضوعات قابل بحث عبارتند از:

تاریخ	موضوع	تاریخ	موضوع
	مقدمه- معرفی برخی نرم‌افزارهای مهم		اصول شبیه سازی مونته کارلو۲ - انتگرال گیری Variational MC
	برنامه نویسی و نوشتن Bash معرفی سیستم سرمد		اصول شبیه سازی مونته کارلو۳ - روش متروپولیس حلقه مارکوف مونت کارلو MCMC
	تخمین خطا ۱		اصول شبیه سازی مونته کارلو۴ HMC
	تخمین خطا ۲		اصول شبیه سازی مونته کارلو۵ Ising model
	تابع توزیع ۱ PDF Simple estimator		الگوریتم ژنتیک
	تابع توزیع ۲ - تبدیل تابع چگالی احتمال تابع چگالی احتمال همبسته		VPython
	تابع همبستگی، تابع دونقطه‌ای ولگشت تصادفی- شبیه‌سازی		مدل کردن داده‌ها ۱ (Bayesian Statistics)
	معادله لانژون و شبیه‌سازی آن		مدل کردن داده‌ها ۲ (Likelihood Analysis)
	مشتق‌گیری و انتگرال‌گیری عددی آشنایی با برخی از توابع کتابخانه‌ای حل دستگاه معادلات		مدل کردن داده‌ها ۳ (Numeric Approach)
	معرفی برخی از روشهای عددی برای حل معادلات دیفرانسیل- روش خودسازگار		مدل کردن داده‌ها ۴ (Confidence Interval)
	نظریه آشوب (تولید) نوسانگرهای جفت شده آشوبی دیاگرام فاز ۱		مدل کردن داده‌ها ۵ (Fisher Matrix)
	فراکتالها (تولید)		Data science: Data management, pre-processing, visualization, augmentation
	استفاده از کتابخانه در فرترن		Data science: Machine learning and Deep learning
	اصول شبیه سازی مونته کارلو ۱		جمع بندی درس

سیدمحمدصادق موحد

۹۶/۱۱/۰۷