

باسمه تعالی

درس روشهای پیشرفته در فیزیک محاسباتی

نیم سال دوم سال تحصیلی ۹۹-۹۸

ارائه دهنده: سید محمد صادق موحد یکشنبه و سه شنبه ساعت ۱۳-۱۰

استاد حل تمرین: پویان گودرزی

(۱) نمره درس شامل حل تمرینات ۱۰ نمره، ۸ نمره امتحان میان ترم و پایانی و ۲ نمره پروژه محاسباتی و ۱ نمره کویزهای 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 Windows یا Linux یا Macintosh (OS X) که دارای اجرا کننده Fortran

90 یا C++ و دیگر نرم افزارهای مورد نیاز مانند matlab و VPython باشد. استفاده از رایانه شخصی قویاً توصیه

می شود.

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

دارید توصیه می شود.

(۴) با توجه به اهمیت پروژه های 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 داده‌ها، 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 انتگرال گیری عددی،
- * شبیه سازی فرآیندهای تصادفی (معادله لانژون، ولگشت تصادفی و ..)
- * فرآیندهای آشوبی و شبیه سازی و تحلیل آنها
- * حل معادلات ویژه مقاداری و قطری سازی ماتریسها
- * روش تفاضل محدود در حل معادلات دیفرانسیل
- * شبیه سازی مونت کارلو (کاربردها در سیستم‌های آماری و مدلسازی داده‌ها، انتگرال گیری، مونت کارلو وردشی، مونت کارلو همیلتونی، زنجیره مارکوف مونت کارلو)
- * گذار فاز 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 شبیه سازی 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 نیک عمل 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, “*Computational Physics*” (2011).
- 12- <http://www.ghamouza.com/data-science-books/>
- 13- http://www.deeplearningbook.org/lecture_slides.html

(۷) برخی از مهم ترین موضوعات قابل بحث عبارتند از:

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

سیدمحمدصادق موحد

۹۸/۱۲/۱۱