

Universitatea “ Babeş-Bolyai” Cluj-Napoca
Facultatea de Fizică, Scoala doctorala de Fizica
Anul universitar 2008/2009
Semestrul: II

S Y L L A B U S

I. Informații generale despre curs, seminar și lucrări de laborator

Metode de simulări computaționale

Anul de studii: I (sem. II)

Codul: FSD0007

Nr. de credite: 20

Nr. ore / săptămână: 2 curs + 1 seminar

Locul de desfășurare: conform indicației din Orar

Programarea în orar: conform orarului care se va întocmi

II. Informații despre titularii cursului

Nume: Zoltan Neda, Titus Beu

Grad didactic: Prof. Univ.

Titlu științific: Dr.

E-mail: zneda@phys.ubbcluj.ro, tbeu@phys.ubbcluj.ro,

Telefon: 405300, int. 5156, 5183

Ore de audiență: 2 ore / săptămână

III. Obiectivele disciplinei și competențe

Obiective: Dobândirea de cunoștințe referitoare la posibilitățile oferite de simulări computaționale în știința materialelor, magnetism, fizica statistică, fizica atomică, și aplicații interdisciplinare în biologie și economie. Însușirea metodelor de simulare de tip Monte Carlo și Dinamica Moleculară. Aplicarea acestor metode la probleme cât mai variate.

Competențe: Doctoranzii vor dobândi cunoștințe utile pentru aplicarea metodelor metodelor avansate de simulări computaționale. Ele vor fi aplicate pentru cercetările angajate în tezele lor de doctorat.

IV. Bibliografie:

[1] Z. Neda ; Introduction to Stochastic Simulation Methods in Physics

<http://www.phys.ubbcluj.ro/~zneda/edu/mc.htm>

[2] H. Gould and J. Tobochnik Introduction to Computer Simulation Methods and applications in physics (Addison-Wesley, 1996).

[3] A. MacKinnon: Computational Physics online course

(<http://b.sst.ph.ic.ac.uk/~angus/Lectures/compphys/compphys.html>)

[4] J. M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press (1999).

[5] R. C. Verma, P. K. Ahluwalia, and K. C. Sharma, Computational Physics: An Introduction, New Age Publishers, New Delhi (Earlier Wiley Eastern India) (2000).

[6] M. Suzuki, editor, Quantum Monte Carlo Methods, Springer-Verlag (1987).

[7] William Gibbs, Computation in Modern Physics, World Scientific (2006), third edition.

[8] Mark Newman and Gerald T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University Press (1999).

[9] K. H. Hoffman and M. Schreiber, editors, Computational Physics, Springer-Verlag (1996). M. Metcalf, J. Reid, "Fortran 90/95 Explained" (University Press, Oxford, 1996).

[10] T.A. Beu, "Molecular Dynamics Simulations", (Intranet Universitatea "Babeş-Bolyai", Cluj-Napoca, 2002) <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/courses.htm>.

[11] T.A. Beu, "Calcul numeric în C, Ediția a III-a" (Grupul MicroInformatica, Editura Albastră, Cluj-Napoca, 2004).

[12] D.C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation" (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

V. Materiale folosite în cadrul procesului educațional specific disciplinei:

a). **la curs:** calculator pentru prelegerea combinată (Power Point, folii, tablă).

b). **la seminar:** calculatoare personale pentru programare C, cluster computațional paralel sub sistemul de operare Linux.

VI. Planificarea / Calendarul întâlnirilor și al verificărilor / examinărilor / intermediare.

a). CURS

Nr. temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1	Metode de simulări stohastice. Clasificarea metodelor de simulări stohastice, Exemple simple : mersul la întâmplare, percolatia. Exemple pentru aplicabilitatea largă a metodei. Generatoare de numere aleatoare. Testarea generatoarelor de numere aleatoare.	2	[1,2]
2	Integrarea Monte Carlo. Metoda de „important sampling”. Noțiuni fundamentale de fenomene stohastice: lanțuri Markov și proprietăți de bază. Metoda Monte Carlo Metropolis și Galuber. Algoritmi de simulare.	2	[1,2,4,8]
3	Metoda Monte Carlo pentru modele Ising. Elemente de fizică statistică referitoare la modelul Ising. Calculul magnetizării, a căldurii specifice, a susceptibilității. Comparări cu rezultate exacte în 1D și 2D. Rezultate pentru cazul 3D. Modele magnetice complexe conținând interacțiuni dipolare și anizotropie magnetică.	2	[1,3,7]
4	Metode Monte Carlo avansate. Algoritmi de cluster: metoda Wolf, metoda Swendsen și Wang. Metoda Histogramelor. Metoda Monte Carlo Microcanonică. Aplicații ale acestor metode la modele de magnetizări.	2	[1, 5,9]
5	Metoda Monte Carlo cuantică. Modele de spin cuantice: hamiltonianul de spin cuantici, hamiltonianul Stoner,	2	[1,6]

	hamiltonianul Hubbard, hamiltonianul de electroni interactivi in forma cuantificarii a II-a. Elemente de fizica statistica cuantica. Calculul sumei de stare pentru sisteme cuantice. Bazele metodei Monte Carlo cuantice: transformarea Trotter-Suzuki. Metoda cuantica MC pentru electroni itineranti in 1D.		
6	Aplicatii interdisciplinare al metodei Monte Carlo. Modelul Potts si aplicatii interdisciplinare. Modelul „voter” si aplicatii interdisciplinare. Rețele aleatoare si aplicatii interdisciplinare. Modelul correlation clustering si aplicatii interdisciplinare. Modele de tip spin-glass si aplicatii interdisciplinare. Metoda Monte Carlo in studiul modelelor amintite.	2	[7,8,9]
7	Modele de sisteme și potențiale de interacțiune Sisteme atomice, moleculare și cristaline. Funcții de potențial și calculul interacțiunilor. Modelarea și ajustarea funcțiilor de potențial. Construcția sistemelor moleculare.	2	0 p. 12-15 0
8	Proprietăți de echilibru ale fluidelor simple Măsurători termodinamice. Structură. Funcția de distribuție radială. Formarea clusterilor.	2	0 p. 78-113 0
9	Proprietăți dinamice ale fluidelor simple. Coeficienți de transport (difuzie, vâscozitate, conductibilitate termică). Funcții de corelație spațiu-timp. Funcția de autocorelație a vitezei.	2	0 p. 114-142 0
10	Molecule rigide Dinamică (coordonate, quaternioni, ecuații de mișcare, controlul temperaturii). Construcție moleculară (exemplu: apa). Calculul structurii clusterilor moleculari. Metoda "simulated annealing". Măsurători (funcții de distribuție radială, legături de hidrogen).	2	0 p. 191-221
11	Molecule flexibile Potențiale intramoleculare. Simularea proprietăților vibraționale ale clusterilor moleculari din spectrele Fourier ale funcțiilor de autocorelație.	2	0 p. 222-233
12	Dinamică moleculară tight-binding Ecuații unielectronice parametrizate pentru sisteme atomice cu coordinare sp^3 . Proprietăți structurale și spectroscopice ale fullerenelor.	2	0 p. 373-406

b). SEMINARII

Nr. Temă	Tematica	Nr. ore	Bibliografie
1	Generarea numerelor aleatoare. Programare C. Generatoare de numere aleatoare cu distributii uniforme si neuniforme. Testarea generatoarelor de numere aleatoare.	1	[1,2]
2	Scrierea de programe pentru integrarea Monte Carlo. Calculul valorii lui PI cu integrale Monte Carlo. Integrarea unor functii exponentiale si polinomiale cu metoda MC.	1	[1,2,4,8]

3	Scrierea unui program in C pentru studiul modelului Ising . Studiul cazului 3D prin simulari pe clusterul computational paralel.	1	[1,3,7]
4	Studiul unui program de simulari pentru metoda Monte Carlo Wolf . Studiul modelului Ising cu algoritmul Wolf.	1	[1, 5,9]
5	Studiul unui program de simulari a electronilor itineranti in 1D prin metoda cuantica Monte Carlo.	1	[1,6]
6	Simularea cresterilor de graunte in metale prin modelul Potts studiat cu metoda Monte Carlo BKL.	1	[7,8,9]
7	Modele de sisteme și potențiale de interacțiune Funcții de potențial și calculul interacțiunilor. Modelarea și ajustarea funcțiilor de potențial. Construcția sistemelor moleculare. Constructia rutinelor, problematizare legate de eficienta.	1	0 p. 12-15 0
8	Proprietăți de echilibru ale fluidelor simple Măsurători termodinamice. Structură. Funcția de distribuție radială. Formarea clusterilor.	1	0 p. 78-113 0
9	Proprietăți dinamice ale fluidelor simple. Coeficienți de transport (difuzie, vâscozitate, conductibilitate termică). Funcții de corelație spațiu-timp. Funcția de autocorelație a vitezei. Rutine, metode alternative.	1	0 p. 114-142 0
10	Molecule rigide Dinamică (coordonate, quaternioni, ecuații de mișcare, controlul temperaturii). Construcție moleculară (exemplu: apa). Calculul structurii clusterilor moleculari. Metoda "simulated annealing". Măsurători (funcții de distribuție radială, legături de hidrogen).	1	0 p. 191-221
11	Molecule flexibile Potențiale intramoleculare. Simularea proprietăților vibraționale ale clusterilor moleculari din spectrele Fourier ale funcțiilor de autocorelație.	1	0 p. 222-233
12	Dinamică moleculară tight-binding Ecuații unielectronice parametrizate pentru sisteme atomice cu coordinare sp^3 . Proprietăți structurale și spectroscopice ale fullerinelor.	1	0 p. 373-406

VII. Mod de evaluare

- 40% evaluare pe parcurs (teme de casa)
- 10% intocmirea unor referate pe o tematica data
- 50% proiect final

Data,
11.07.2008

Semnatura titularilor,