

FIȘA DISCIPLINEI
2020-2021

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea "Babeș-Bolyai" Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Fizică
1.3 Departamentul	Departamentul de Fizică Biomoleculară
1.4 Domeniul de studii	Fizică / Știința Mediului / Științe Inginerești Aplicate
1.5 Ciclul de studii	Licență
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Fizică, Fizică informatică, Fizică medicală, Fizica mediului

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Metode numerice și de simulare în fizică						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. Dr. Titus Beu						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. Dr. Titus Beu						
2.4 Titularul activităților de laborator							
2.5 Anul de studiu	IV	2.6 Semestrul	7	2.7 Tipul de evaluare	C	2.8 Regimul disciplinei	S

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care:					
3.2 curs	2	3.3 seminar	1	3.4 laborator	1		
3.5 Total ore din planul de învățământ	56	Din care:					
3.6 curs	28	3.7seminar	14	3.8 laborator	14		
Distribuția fondului de timp:							ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe							14
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren							7
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							28
Tutoriat							3
Examinări							3
Alte activități:							–
3.9 Total ore studiu individual	70						
3.10 Total ore pe semestru	126						
3.11 Numărul de credite	5						

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	<ul style="list-style-type: none"> Promovarea cursurilor de Algebră liniară și Analiză matematică.
4.2 de competențe	<ul style="list-style-type: none"> Cunoștințe de programare într-un limbaj.

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Proiector
5.2 De desfășurare a seminarului	<ul style="list-style-type: none"> Proiector
5.3 De desfășurare a laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Proiector, rețea de calculatoare

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor asimila conceptele de bază, formalismul și tehnicile numerice și de simulare specifice fizicii, și vor fi capabili să rezolve prin metode numerice probleme fundamentale de fizică aplicată. • Studenții își vor dezvolta deprinderi de utilizare a metodelor numerice și de simulare generale în domeniul ecuațiilor fizicii matematice, operând cu aproximații numerice ale ecuațiilor și funcțiilor speciale. • Studenții vor dobândi deprinderi de aplicare a metodelor numerice și de simulare în domenii concrete ale fizicii, chimiei sau biofizicii. • Studenții își vor dezvolta capacitatea de a identifica și utiliza adecvat a principalelor legi și principii fizice într-un context dat. • Studenții se vor familiariza cu rezolvarea problemelor de fizică în condiții impuse, folosind metode numerice și statistice. • Studenții se vor familiariza cu abordarea interdisciplinară a unor teme din domeniul fizicii.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> • Studenții vor asimila cunoștințe interdisciplinare. • Studenții vor dobândi deprinderi de lucru analitic cu formalisme teoretice complexe și de documentare individuală. • Studenții vor dobândi abilități de lucru în grup, de argumentare a unor modalități de rezolvare a problemelor și de identificare a soluțiilor optime. • Studenții își vor dezvolta spiritul de competiție și cel de echipă. • Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată. Aplicarea strategiilor de muncă eficientă și responsabilă, de punctualitate, seriozitate și răspundere personală, pe baza principiilor, normelor și a valorilor codului de etică profesională. Aplicarea, în contextul respectării legislației, a drepturilor de proprietate intelectuală (inclusiv transfer tehnologic), a metodologiei de certificare a produselor, a principiilor, normelor și valorilor codului de etică profesională în cadrul propriei strategii de muncă riguroasă, eficientă și responsabilă. • Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. Documentarea în limba română și cel puțin într-o limbă străină, pentru dezvoltarea profesională și personală, prin formare continuă și adaptarea eficientă la noile descoperiri științifice. Identificarea oportunităților de formare continuă și valorificarea eficientă a resurselor și tehnicilor de învățare pentru propria dezvoltare.

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> • Însușirea conceptelor, formalismului matematic și tehnicilor de programare numerică și simulare specifice fizicii.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> • Formarea unui mod de gândire algoritmic, specific analizei numerice. • Dezvoltarea unei dexterități și a unui stil de programare științifică în limbajul Python. • Dobândirea capacității de implementare a unor metode și algoritmi numerici avansați, în cadrul unor proiecte ample desfășurate în grupuri de cercetare din domenii ale fizicii computaționale, chimiei fizice, științei materialelor și biofizicii.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. TEHNICI DE PROGRAMARE ȘTIINȚIFICĂ. Elemente de bază ale limbajului Python. Concepte de programare. Funcții și mecanisme de transmitere a parametrilor. Operații cu tablouri.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 11-30 [2] Cap. 2
2. ELEMENTE DE GRAFICĂ ȘTIINȚIFICĂ. Facilități grafice în Python – modulul Tkinter. Widget-uri și funcții grafice de bază. Reprezentarea funcțiilor de o variabilă. Histograme. Reprezentări prin curbe de nivel și reprezentări 3D.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 31-61 [2] Cap. 3
3. EVALUAREA FUNCȚIILOR. Evaluarea polinoamelor prin schema lui Horner. Evaluarea funcțiilor analitice. Frații continue. Polinoame ortogonale. Armonice sferice și funcții Legendre asociate. Funcții Bessel sferice.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 85-125 [2] Cap. 5
4. SISTEME DE ECUAȚII ALGEBRICE LINIARE. Metoda de eliminare a lui Gauss. Pivotarea. Metoda Gauss-Jordan. Metoda factorizării LU. Sisteme de ecuații liniare cu matrice tridiagonală.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 169-231 [2] Cap. 7
5. PROBLEME DE VALORI ȘI VECTORI PROPRII. Diagonalizarea matricilor prin transformări similare. Metoda lui Jacobi. Probleme de valori proprii generalizate.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 233-264 [2] Cap. 8
6. APROXIMAREA FUNCȚIILOR TABELATE. Interpolare și regresie. Polinomul de interpolare Lagrange. Interpolarea cu funcții spline. Regresia liniară și neliniară.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 265-331 [2] Cap. 9
7. INTEGRAREA FUNCȚIILOR. Formulele de cuadratură Newton-Cotes. Formula trapezelor. Formula lui Simpson. Controlul automat al pasului de integrare. Integrale improprii. Integrale multidimensionale.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 333-393 [2] Cap. 10
8. INTEGRARE NUMERICĂ ȘI METODA MONTE-CARLO. Metoda reducerii varianței. Generarea variabilelor aleatoare cu distribuții particulare. Algoritmul Metropolis.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 395-426
9. ECUAȚII DIFERENȚIALE ORDINARE. Metoda dezvoltării în serie Taylor. Metoda lui Euler. Metodele Runge-Kutta. Controlul automat al pasului de integrare. Metode pentru ecuații de ordinul 2 (Euler-Cromer și Verlet).	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 427-507 [2] Cap. 9
10. ECUAȚII CU DERIVATE PARȚIALE. Probleme cu condiții inițiale pentru ecuații de tip parabolic. Metoda explicită cu diferențe finite. Analiza de stabilitate von Neumann. Metoda implicită și metoda Crank-Nicholson.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	0 p 509-585 [2] Cap. 10
11. DRUMURI ALEATOARE. Drumuri aleatoare unidimensionale și bidimensionale. Relația cu procesul de difuzie. Modelul gazului reticulat. Simulări Monte Carlo.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	[6] p 373-406
12. SIMULĂRI MONTE-CARLO ÎN ANSAMBLUL MICROCANONIC. Algoritm cu demon. Gazul ideal clasic unidimensional. Temperatura și ansamblul canonic.	Expunere. Ilustrare grafică. Dezbateri context interdisciplinar.	[6] p 543-561
Bibliografie		

- [1] T. A. Beu, "Introduction to Numerical Programming: A Practical Guide for Scientists and Engineers Using Python and C/C++" (CRC Press / Taylor & Francis, 2015) 674 pp., ISBN 9781466569676.
- [2] T. A. Beu, "Introduction to Numerical Programming", 2014, <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/INP/index.html> (site asociat cărții [1]).
- [3] T.A. Beu, "Calcul numeric în C, Ediția a II-a" (Grupul MicroInformatica, Editura Albastră, Cluj-Napoca, 2004).
- [4] T.A. Beu, "Numerical methods for physicists", <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/courses.htm> (Intranet Universitatea "Babeș-Bolyai", Cluj-Napoca, 2000).
- [5] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, "Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Second Edition" (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [6] H. Gould, J. Tobochnik, "An Introduction to Computer Simulation Methods" (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA, 1996).

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
13. TEHNICI DE PROGRAMARE ȘTIINȚIFICĂ. Transmiterea de parametri către/dinspre funcții. Colecții de date – liste și tuple-uri. Alocarea tablourilor și verificarea unor identități matriciale.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 11-30 [2] Cap. 2
14. ELEMENTE DE GRAFICĂ ȘTIINȚIFICĂ. Widget-uri și funcții grafice de bază în Python. Principii generale de reprezentare. Animație. Reprezentarea funcțiilor de o variabilă. Histograme. Reprezentări prin curbe de nivel și reprezentări 3D.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 31-61 [2] Cap. 3
15. EVALUAREA FUNCȚIILOR. Evaluarea polinoamelor prin schema lui Horner. Evaluarea funcțiilor analitice. Frații continue. Polinoame ortogonale. Armonice sferice și funcții Legendre asociate. Funcții Bessel sferice.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 85-125 [2] Cap. 5
16. SISTEME DE ECUAȚII ALGEBRICE LINIARE. Metoda de eliminare a lui Gauss. Pivotarea. Metoda Gauss-Jordan. Sisteme de ecuații liniare cu matrice tridiagonală.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 169-231 [2] Cap. 7
17. PROBLEME DE VALORI ȘI VECTORI PROPRII. Diagonalizarea matricilor prin transformări similare. Metoda lui Jacobi. Aplicații: centru de masă, tensor/momente de inerție, rotația corpurilor în sistemul centrului de masă. Probleme de valori proprii generalizate din chimia cuantică.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 233-264 [2] Cap. 8
18. APROXIMAREA FUNCȚIILOR TABELATE. Interpolare și regresie. Polinomul de interpolare Lagrange. Interpolarea cu funcții spline. Regresia liniară și neliniară.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 265-331 [2] Cap. 9
19. INTEGRAREA FUNCȚIILOR. Formula trapezelor și formula lui Simpson. Controlul automat al pasului de integrare. Integrale improprii. Integrale multidimensionale.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 333-393 [2] Cap. 10
20. INTEGRARE NUMERICĂ ȘI METODA MONTE-CARLO. Metoda reducerii varianței. Generarea variabilelor aleatoare cu distribuții particulare. Algoritmul Metropolis.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 395-426

21. ECUAȚII DIFERENȚIALE ORDINARE. Metoda lui Euler, și metodele Runge-Kutta. Controlul automat al pasului de integrare. Metode pentru ecuații de ordinul 2 (Euler-Cromer și Verlet). Aplicații: oscilații nearmonice, lansarea oblică a proiectilelor, mișcări orbitale ale particulelor și planetelor.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 427-507 [2] Cap. 9
22. ECUAȚII CU DERIVATE PARȚIALE. Probleme cu condiții inițiale pentru ecuații de tip parabolic. Metoda explicită cu diferențe finite. Analiza de stabilitate von Neumann. Metoda implicită și metoda Crank-Nicholson. Aplicații: difuzia în sisteme multistrat.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	0 p 509-585 [2] Cap. 10
23. DRUMURI ALEATOARE. Drumuri aleatoare unidimensionale și bidimensionale. Relația cu procesul de difuzie. Modelul gazului reticulat. Simulări Monte Carlo.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	[6] p 373-406
24. SIMULĂRI MONTE-CARLO ÎN ANSAMBLUL MICROCANONIC. Algoritm cu demon. Gazul ideal clasic unidimensional. Temperatura și ansamblul canonic.	Scriere/modificare de programe. Dezbateri variante implementare. Discuția rezultatelor.	[6] p 543-561

Bibliografie

- [1] I. T. A. Beu, "Introduction to Numerical Programming: A Practical Guide for Scientists and Engineers Using Python and C/C++" (CRC Press / Taylor & Francis, 2015) 674 pp., ISBN 9781466569676.
- [2] T. A. Beu, "Introduction to Numerical Programming", 2014, <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/INP/index.html> (site asociat cărții [1]).
- [3] T.A. Beu, "Calcul numeric în C, Ediția a II-a" (Grupul MicroInformatica, Editura Albastră, Cluj-Napoca, 2004).
- [4] T.A. Beu, "Numerical methods for physicists", <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/courses.htm> (Intranet Universitatea "Babeș-Bolyai", Cluj-Napoca, 2000).
- [5] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, "Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, Second Edition" (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [6] H. Gould, J. Tobochnik, "An Introduction to Computer Simulation Methods" (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA, 1996).

8.3 Laborator	Metode de predare	Observații

Bibliografie

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

- Conținutul informațional și caracterul formativ al cursului sunt compatibile cu practicile din principalele universități din țară și din universități de prestigiu din străinătate.
- În vederea creșterii șansei de absorbție pe piața muncii a absolvenților (în cercetare, industrie, sau învățământ), cursul prezintă pe lângă temele fundamentale clasice și teme de actualitate, cu aplicabilitate directă.
- Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața de muncă, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele impuse de specificul învățământului preuniversitar, al institutelor de cercetare și al mediului de afaceri

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Verificări pe parcurs (2)	Lucrare scrisă	10%
10.5 Seminar	Calitatea și numărul intervențiilor; prezență	Activitatea de seminar	25%
10.6 Laborator			25%
10.7 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">• Condiție de prezentare la examen: prezența la minim 75% din activitățile de seminar.• Verificări scrise pe parcurs la curs și seminar – minim media 5• Examen final la sfârșitul semestrului cu pondere de 40%.			

Semnătura titularului de curs
Prof. Dr. Titus Beu



Semnătura titularului de seminar
Prof. Dr. Titus Beu



Semnătura titularului de laborator
Prof. Dr. Titus Beu



Data completării

Data avizării în departament

Semnătura directorului de departament