

Розширений план лекцій
навчальної дисципліни
Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану

Рівень вищої освіти	Доктор філософії
галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	104 фізика та астрономія
освітня програма	освітньо-професійна програма «Фізика та астрономія»
спеціалізація	
вид дисципліни	за вибором аспіранта
Інститут	Інститут теоретичної фізики ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут»

2022 / 2023 навчальний рік
д.ф.-м.н., ст. досл. Андрій СОТНІКОВ

Лекція 1. (2 год.) Сучасні мови програмування та бібліотеки для написання алгоритмів у фізиці конденсованого стану. Мета, задачі та цілі моделювання та числових методів у фізиці конденсованого стану.

Лекція 2. (2 год.) Перелік мов програмування низького та високого рівнів для вирішення задач курсу. Базові операції та конструкції. Оперування масивами змінних. Методи обробки та виводу даних чисельних обчислень.

Лекція 3. (2 год.) Теорія перколяції (протікання) і алгоритм Гошена-Копельмана. Основні різновиди перколяції, приклади застосування моделювання в фізиці конденсованого стану. Поріг перколяції та ймовірність протікання. Алгоритм Гошена-Копельмана. Коректне надання ярликів для кластерів. Критична поведінка. Довжина кореляцій та критичні експоненти. Принципи масштабування зі скінченних розмірів системи.

Лекція 4. (2 год.) Модель Ізінга та методи її розв'язання. Моделювання поведінки магнетиків. Статистичний опис і термодинамічні характеристики одновимірної моделі Ізінга. Метод перехідних матриць. Результат Онсагера для двовимірної моделі Ізінга. Концепція застосування перехідних матриць для скінченних систем. Молекулярна теорія Вейса.

Лекція 5. (2 год.) Монте-Карло моделювання, алгоритм Метрополіса-Гастінгса. Генератори псевдовипадкових чисел. Принципи стохастичного моделювання. Ергодичність системи. Алгоритм Метрополіса-Гастінгса. Процеси термалізації системи та ефекти автокореляцій. Обчислення

термодинамічних характеристик і відносних похибок вимірювань в околі фазового переходу.

Лекція 6. (2 год.) Нейронні мережі. Модель Гопфілда. Засади моделювання нейронних мереж за допомогою моделей з фізики конденсованого стану. Формування нейронних зв'язків. Процеси навчання та згадування у нейронній мережі. Модель Гопфілда. Ємність нейронної мережі та ймовірність колапсу.

Лекція 7. (2 год.) Методи молекулярної динаміки. Концепції фазового простору та ансамблів. Функціональний опис міжмолекулярної взаємодії. Контроль температури. Граничні умови. Списки сусідніх молекул.

Лекція 8. (2 год.) Ініціалізація та досягнення рівноваги. Обчислення статичних і динамічних характеристик. Елементи опису нерівноважних процесів.

Лекція 9. (2 год.) Модель Габбарда та можливості її моделювання. Особливості побудови моделі та можливості опису різних класів квантових систем. Обмеженість класичних алгоритмів, експоненційне зростання гільбертового простору.

Лекція 10. (2 год.) Шляхи розширення моделі Габбарда. Мотивація побудови універсальних квантових симуляторів. Використання холодних атомів у оптичних ґратках та методи опису таких систем.

Лекція 11. (2 год.) Розкладання на границях слабого і сильного зв'язку, ефективні моделі. Елементи теорії фермі-рідини. Спіново-хвильовий опис і середньопольовий підхід Хартрі-Фока. Розкладання в границі сильного зв'язку і перетворення Шріффера-Вольфа. Спінова модель Гейзенберга та її термодинамічні характеристики. Теорема Мерміна-Вагнера.

Лекція 12. (2 год.) Підхід точної діагоналізації квантових гамільтоніанів. Особливості зростання вимірності гільбертового простору для квантових моделей на ґратці. Використання величин, що зберігаються, для побудови блокової структури матриці гамільтоніану.

Лекція 13. (2 год.) Бінарна форма запису базисних станів у підході точної діагоналізації квантових гамільтоніанів. Вимірювання статичних та динамічних характеристик систем. Елементи динамічної теорії середнього поля. Зв'язок динамічної теорії середнього поля з підходом молекулярного поля Вейса.

Лекція 14. (2 год.) Домішковий розв'язувач у динамічній теорії середнього поля. Модель Андерсона та чисельні методи її розв'язання. Рівняння самоузгодження. Узагальнення теоретичного підходу для скінченних і неоднорідних систем.

Лекція 15. (2 год.) Підходи теорії тензорних мереж. Подання хвильової функції одновимірної взаємодійної системи багатьох частинок у вигляді матричних множників. Ентропія заплутаності та її зростання з еволюцією системи. Варіаційний принцип із залежністю від часу. Узагальнення підходу для багатовимірних ґраткових систем.

Лекція 16. (2 год.) Елементи квантової теорії Монте-Карло. Модифікація стохастичного моделювання для квантових систем. Фейманівський інтеграл за траєкторіями. Підхід світової лінії для бозонних систем. Проблема ферміонного знаку. Варіаційний підхід Монте-Карло із залежністю від часу.