

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Генеральний директор


« 30 » // 2022 р.

Микола ШУЛЬГА

2022 р.



РОБОЧА ПРОГРАМА

навчальної дисципліни

Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану

Назва навчальної дисципліни

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

Програму рекомендовано до затвердження
Науково-технічною радою ННЦ ХФТІ

Від "29" 11 2022 року, протокол № 6


РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:

д.ф.-м.н., ст. досл. Андрій СОТНІКОВ

Програму схвалено на засіданні Вченої ради Інституту теоретичної
фізики ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут»

від "19" 09 2022 року, протокол № 4

т.в.о. директора Інституту теоретичної фізики ННЦ «Харківський
фізико-технічний інститут»



(підпис)

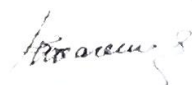
Леонід ДАВИДОВ

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми
«Фізика та астрономія»

назва освітньої програми

Гарант освітньо-професійної програми «Фізика та астрономія»



(підпис)

Віктор ТКАЧЕНКО

(прізвище та ініціали)

Вступ

Дисципліна «Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану» є частиною професійної підготовки аспірантів за вибором ННЦ ХФТІ за напрямом 10 Природничі науки, за спеціальністю – 104 фізика і астрономія, яка викладається протягом третього року навчання.

ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою викладання навчальної дисципліни є засвоєння аспірантами теоретичних засад і сучасних методів моделювання за допомогою числових методів у фізиці конденсованого стану.

1.1 Основними завданнями вивчення дисципліни «Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану» є

(1) оволодіння знаннями, необхідними для проведення високопродуктивних обчислень;

(2) отримання практичних навичок з написання програм із застосуванням математичних бібліотек високого рівня для чисельних розрахунків;

(3) засвоєння основних характеристик та методів опису процесів у фізиці конденсованого стану;

(4) засвоєння базових властивостей фізичних ефектів, які покладено в основу багачастинкових процесів, як-от урахування ефектів взаємодії, фазові переходи, термалізація та стохастичний вплив;

(5) опанування методів теоретичного опису класичних і квантових систем багатьох частинок.

1.2.1. Формування інтегральних компетентностей

Здатність продукувати нові ідеї, розв'язувати комплексні проблеми науково-дослідницької та інноваційної діяльності у сфері фізики, застосовувати методологію науково-дослідницької та педагогічної діяльності, а також проводити власне наукове дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

1.2.2 Формування наступних загальних компетентностей

ЗК01. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК03. Здатність розв'язувати комплексні наукові проблеми на основі системного наукового світогляду та загального культурного кругозору із дотриманням професійної етики та академічної доброчесності.

1.2.3. Формування наступних спеціальних (фахових) компетентностей

СК01. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми дослідницького характеру в сфері фізики та/або астрономії, інтегрувати знання з різних галузей, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних досліджень.

СК02. Здатність відстежувати тенденції розвитку фізики та/або астрономії, їх прикладних застосувань, критично переосмислювати наявні знання та методи фундаментальних та прикладних наукових досліджень.

СК06. Здатність застосовувати сучасні методи, методики, технології, інструменти та обладнання для проведення прикладних та фундаментальних наукових досліджень у галузі фізики та/або астрономії.

1.3. Кількість кредитів – 4.

1.4. Загальна кількість годин – 120.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни:

Опис навчальної дисципліни «Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану»

Галузь знань, напрям підготовки, спеціальність, освітньо-кваліфікаційний рівень	
Галузь знань	10 – Природничі науки
напрямок підготовки	
спеціальність	104 – фізика та астрономія
освітньо-кваліфікаційний рівень	Доктор філософії
Мова навчання	Українська
Характеристика навчальної дисципліни	
Вид	За вибором аспіранта
Загальна кількість годин	120
Кількість кредитів ECTS	4
Кількість змістових модулів	2
Форма контролю	залік
Показники навчальної дисципліни	
Рік підготовки	III
Лекційні заняття	32
Практичні заняття	16
Самостійна робота	70
Консультації	2

1.6. Передумови для вивчення дисципліни.

Знання аспірантами молекулярної фізики, термодинаміки, статистичної фізики і квантової механіки в межах стандартних університетських курсів. Вміння створювати комп'ютерні програми за допомогою сучасних мов програмування (наприклад, Matlab або Python) та володіння методами наближених розрахунків.

1.7. Заплановані результати навчання

Під час вивчення дисципліни аспіранти набувають теоретичних знань та практичних навичок з таких питань: модель Ізінга та методи її розв'язання, Монте-Карло моделювання, алгоритм Метрополіса-Гастінгса, теорія перколяції (протікання), алгоритм Гошена-Копельмана, нейронні мережі, модель Гопфілда, квантові ґраткові системи, моделі Габбарда та Гейзенберга, алгоритм точної діагоналізації квантових гамільтоніанів на ґратці, елементи динамічної теорії середнього поля, методи молекулярної динаміки.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми здобувачі повинні:

PH01. Мати сучасні концептуальні та методологічні знання з фізики та/або астрономії та дотичних до них міждисциплінарних напрямів, а також необхідні навички, достатні для проведення фундаментальних і прикладних наукових досліджень з метою отримання нових знань та/або здійснення розробок та інновацій.

PH04. Формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичних і експериментальних досліджень, математичного моделювання, комп'ютерного експерименту, а також наявні літературні дані.

PH05. Розробляти моделі процесів і систем у фізиці та/або астрономії та дотичних міждисциплінарних напрямках, використовувати їх у науково-дослідницькій діяльності для отримання нових знань та/або створення розробок та інноваційних продуктів.

Після вивчення курсу здобувач повинен знати:

- основні теоретичні засади чисельного моделювання систем багатьох частинок;
- основні парадигми методів чисельного аналізу класичних і квантових систем;
- принципи побудови алгоритмів вирішення задач у фізиці конденсованого стану;
- основні проблеми, які виникають при створенні алгоритмів для систем багатьох частинок та шляхи їх вирішення;
- принципи опису скінченновимірних квантових систем;
- основні конструкції для вдосконалення опису методами Монте-Карло;
- основні моделі, які застосовують для опису квантових систем у фізиці конденсованого стану;
- принципи масштабування в моделюванні системами скінченних розмірів;
- фізичні механізми, які призводять до магнітного впорядкування в фізиці конденсованого стану;
- термодинамічні характеристики, що можуть бути виміряні за допомогою чисельних методів у фізиці конденсованого стану та порівняні з відповідними експериментами.

В результаті вивчення дисципліни здобувач повинен вміти:

- складати алгоритми для моделювання фізичних процесів у фізиці конденсованого стану;
- визначати можливості вдосконалення та межі застосовності основних алгоритмів;
- реалізовувати обчислення за допомогою сучасних мов програмування і відповідних бібліотек;
- обчислювати середні значення фізичних величин при квантовомеханічному описі систем багатьох частинок;
- розраховувати поведінку термодинамічних характеристик систем в околі фазових переходів;
- обчислювати кореляційні функції у різних статистичних моделях;
- розраховувати порогові значення фізичних параметрів для різних просторових характеристик систем;
- самостійно опанувати та використовувати літературу з питань моделювання та числових методів у фізиці конденсованого стану.

Контроль знань аспіранта здійснюється за модульно-рейтинговою системою. Змістовий модуль 1 включає теми 1–5, змістовий модуль 2 – теми 6–11.

2. ЗМІСТ ТА СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. Моделювання класичних систем у фізиці конденсованого стану.

ТЕМА 1. Сучасні мови програмування та бібліотеки для написання алгоритмів у фізиці конденсованого стану. (11 год.) Мета, задачі та цілі моделювання та числових методів у фізиці конденсованого стану. 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.

ТЕМА 2. Теорія перколяції (протікання) і алгоритм Гошена-Копельмана. (9 год.) 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.

ТЕМА 3. Модель Ізінга та методи її розв'язання. (9 год.) 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.

ТЕМА 4. Монте-Карло моделювання, алгоритм Метрополіса-Гастінгса. (9 год.) Генератори псевдовипадкових чисел. Принципи стохастичного моделювання. Ергодицичність системи. Алгоритм Метрополіса-Гастінгса. Процеси термалізації системи та ефекти автокореляцій. Обчислення термодинамічних характеристик і відносних похибок вимірювань в околі фазового переходу.

ТЕМА 5. Нейронні мережі. Модель Гопфілда. (9 год.) 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.

ТЕМА 6. Методи молекулярної динаміки. (12 год.) Концепції фазового простору та ансамблів. Функціональний опис міжмолекулярної взаємодії. Контроль температури. Граничні умови. Списки сусідніх молекул. Ініціалізація та досягнення рівноваги. Обчислення статичних і динамічних характеристик. Елементи опису нерівноважних процесів.

Модуль 2. Чисельні методи опису квантових систем багатьох частинок у фізиці конденсованого стану.

ТЕМА 7. Модель Габбарда та можливості її моделювання. (11 год.) Особливості побудови моделі та можливості опису різних класів квантових систем. Обмеженість класичних алгоритмів, експоненційне зростання гільбертового простору. Шляхи розширення моделі. Мотивація побудови універсальних квантових симуляторів. Використання холодних атомів у оптичних ґратках та методи опису таких систем.

ТЕМА 8. Розкладання на границях слабкого і сильного зв'язку, ефективні моделі (9 год.) 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.

ТЕМА 9. Підхід точної діагоналізації квантових гамільтоніанів. (11 год.) Особливості зростання вимірності гільбертового простору для квантових моделей на ґратці. Використання величин, що зберігаються, для побудови блокової структури матриці гамільтоніану. Бінарна форма запису базисних станів. Вимірювання статичних та динамічних характеристик систем.

ТЕМА 10. Елементи динамічної теорії середнього поля. (10 год.) Зв'язок динамічної теорії середнього поля з підходом молекулярного поля Вейса. Домішкова модель Андерсона та чисельні методи її розв'язання. Рівняння самоузгодження. Узагальнення теоретичного підходу для скінченних і неоднорідних систем.

ТЕМА 11. Підходи теорії тензорних мереж. (9 год.) 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.

ТЕМА 12. Елементи квантової теорії Монте-Карло. (9 год.) 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.

Структура навчальної дисципліни

Назва лекції	Структура навчальної дисципліни		
	Лекції	Практичні/семінарські заняття	Самостійна робота
Змістовний модуль 1. Моделювання класичних систем у фізиці конденсованого стану.			
Тема 1. Сучасні мови програмування та бібліотеки для написання алгоритмів у фізиці конденсованого стану.	4	2	5
Тема 2. Теорія перколяції (протікання) і алгоритм Гошена-Копельмана.	2	1	6
Тема 3. Модель Ізінга та методи її розв'язання.	2	1	6
Тема 4. Монте-Карло моделювання, алгоритм Метрополіса-Гастінгса.	2	1	6
Тема 5. Нейронні мережі. Модель Гопфілда.	2	1	6
Тема 6. Методи молекулярної динаміки.	4	2	6
Разом за змістовний модуль 1	16	8	35
Змістовний модуль 2. Чисельні методи опису квантових систем багатьох частинок у фізиці конденсованого стану.			
Тема 7. Модель Габбарда та можливості її моделювання.	4	2	5

Тема 8. Розкладання на границях слабкого і сильного зв'язку, ефективні моделі.	2	1	6
Тема 9. Підхід точної діагоналізації квантових гамільтоніанів.	3	2	6
Тема 10. Елементи динамічної теорії середнього поля.	3	1	6
Тема 11. Підходи теорії тензорних мереж.	2	1	6
Тема 12. Елементи квантової теорії Монте-Карло.	2	1	6
Разом за змістовний модуль 2	16	8	35
Всього	32	16	70

Загальний обсяг: 120 год., зокрема: лекцій – 32 год.; практичних/семінарів – 16 год., самостійної роботи – 70 год., консультацій – 2 год.

4. Тематичний план практичних та семінарських занять

№ з/п	Тема	Години
1	Розробка алгоритму Гошена-Копельмана для моделювання перколяції на квадратній ґратці.	2
2	Розробка алгоритму із застосуванням методу перехідних матриць для двовимірної моделі Ізінга.	3
3	Розробка алгоритму Метрополіса-Гастінґса для двовимірної моделі Ізінга.	3
4	Розробка програм для моделювання процесів засвоєння та згадування інформації в нейронних мережах.	3
5	Розробка алгоритму точної діагоналізації одновимірної моделі Фермі-Габбарда.	3
6	Модифікація та використання алгоритму методу матричних множників для моделі Фермі-Габбарда.	2
	Всього	16

5. Самостійна робота

№ з/п	Тема	Години
1	Самостійне опрацювання навчально-методичних посібників та вивчення матеріалу за темами змістовного модуля 1.	35
2	Самостійне опрацювання навчально-методичних посібників та вивчення матеріалу за темами змістовного модуля 2.	35
	Всього	70

Запитання для самоперевірки

1. Які є два різновиди моделювання перколяційних процесів?
2. Що характеризують критичні експоненти і як їх визначають?
3. В чому полягає різниця між феромагнітною і антиферомагнітною моделлю Ізінга?
4. Як обраховують вільну енергію в одновимірній моделі Ізінга?
5. Яким є перший крок в алгоритмі Метрополіса-Гастінгса?
6. Для чого необхідна певна термалізація в алгоритмі Метрополіса-Гастінгса?
7. Яким є гамільтоніан нейронної мережі в моделі Гопфілда?
8. Чому може виникати колапс пам'яті в нейронній мережі?
9. Якими є основні різновиди потенціалів взаємодії у підходах молекулярної динаміки?
10. Якими є критерії досягнення рівноваги в підходах молекулярної динаміки?
11. Що є стимулом розвитку моделі Габбарда?
12. Якими є основні доданки в гамільтоніані Габбарда?
13. В чому полягає спіново-хвильовий підхід?
14. Як можна визначити константу магнітного зв'язку в ефективній моделі Гейзенберга?
15. Як визначити вимірність гільбертового простору для ґраткової моделі?
16. Чому збережувані величини є важливими в підході точної діагоналізації квантових гамільтоніанів?
17. В чому полягає обмеженість динамічної теорії середнього поля?
18. Якими є критерії збіжності алгоритму динамічної теорії середнього поля?
19. Чому підходи матричних множників є ефективними в описі одновимірних систем?
20. Як моделюється динаміка квантових систем у підході матричних множників?
21. В чому полягає проблема ферміонного знаку в Монте-Карло моделюванні квантових систем?

Запитання до заліку

1. Мета, задачі та цілі моделювання та числових методів у фізиці конденсованого стану. Приклади мов програмування низького та високого рівнів для вирішення задач фізики конденсованого стану.

2. Базові операції та конструкції у моделюванні та чисельних методах у фізиці конденсованого стану. Основні різновиди оперування масивами змінних. Методи обробки та виводу даних чисельних обчислень.

3. 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.

4. Моделювання поведінки магнетиків. Статистичний опис і термодинамічні характеристики одновимірної моделі Ізінга. Метод перехідних матриць.

5. Результат Онсагера для двовимірної моделі Ізінга. Концепція застосування перехідних матриць для скінченних систем. Молекулярна теорія Вейса.

6. 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.

7. 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 пам'яті.

8. Методи молекулярної динаміки. Концепції фазового простору та ансамблів. Функціональний опис міжмолекулярної взаємодії. Контроль температури. Граничні умови. Списки сусідніх молекул.

9. Ініціалізація та досягнення рівноваги в методах молекулярної динаміки. Обчислення статичних і динамічних характеристик. Елементи опису нерівноважних процесів.

10. Особливості побудови моделі Габбарда та можливості опису різних класів квантових систем. Обмеженість класичних алгоритмів, експоненційне зростання гільбертового простору.

11. Шляхи розширення моделі Габбарда. Мотивація побудови універсальних квантових симуляторів. Використання холодних атомів у оптичних ґратках та методи опису таких систем.

12. 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.

13. 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. Бінарна форма запису базисних станів. Вимірювання статичних та динамічних характеристик систем.

14. Зв'язок динамічної теорії середнього поля з підходом молекулярного поля Вейса. Домішкова модель Андерсона та чисельні методи її розв'язання. Рівняння самоузгодження. Узагальнення теоретичного підходу для скінченних і неоднорідних систем.

15. 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.

16. Елементи квантової теорії Монте-Карло. Модифікація стохастичного моделювання для квантових систем. Фейнманівський інтеграл за траєкторіями. Підхід світової лінії для бозонних систем. Проблема ферміонного знаку. Варіаційний підхід Монте-Карло для аналізу динаміки квантових систем.

6. Методи контролю

Поточний контроль проводиться у вигляді експрес-контролю та на основі оцінювання практичних робіт здобувачів під час проведення занять, а також самостійних робіт. Підсумковий контроль проводиться у вигляді заліку.

7. Схема нарахування балів

Матеріал курсу «Моделювання та числові методи у фізиці конденсованого стану» згідно з навчальною програмою містить 12 тем. Темі розподілені по модулях відповідно: I модуль – 6 тем (від 1 до 6), II модуль – 6 тем (від 7 до 12). Оцінка роботи здобувачів проводиться за модульно-рейтинговою системою і включає такі види роботи над курсом: практичні роботи, засвоєння теоретичного матеріалу та самостійні роботи.

Теми за курсом			Разом
Модуль 1	Модуль 2	Залік	100
T1-T6	T7-T12		
30	30	40	

T1, T2 ... – теми розділів.

Оцінка за модуль складається з оцінки за практикум, поточний контроль засвоєння теоретичного матеріалу та виконання самостійних робіт. За ці види робіт здобувач може набрати 60 балів.

Для допуску до підсумкового семестрового контролю здобувач в сумі за два модулі має набрати не менше 30-ти балів з 60-ти можливих, тобто не менше 50% від максимально можливого.

На заліку здобувач може одержати від 20 до 40 балів. Між 0 та 20 балами оцінка не виставляється, залік вважається не зданим. Бали, одержані на заліку від 20 до 40 додаються до балів, одержаних у семестрі (30-60 балів). За цією сумою згідно таблиці шкали оцінювання виставляється підсумкова оцінка до залікової книжки.

8. Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90-100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

Критерії оцінювання

питань залікового білету (контрольної роботи)

Заліковий білет (контрольна робота) містить кілька завдань (теоретичні питання або задачі). Кожне завдання має свій ваговий бал (вказується у дужках біля питання) та оцінюється окремо. Сумарно за всі відповіді на екзаменаційні питання можна отримати максимально 40 балів. Сумарний бал за контрольну роботу вказується в тексті відповідної роботи.

№	Характеристика відповіді на кожне з питань залікового білету (контрольної роботи)	% від max балу за відповідь на питання
1	Повна та вірна відповідь на питання або у повному обсязі правильно вирішена практична задача білету	100 %
2	Повна відповідь з незначними помилками (або незначні помилки у розрахунках практичних завдань за наявності вірної розрахункової формули);	80-95 %
3	Неповна, але вірна відповідь (або значні помилки у розрахунках практичних завдань за наявності вірної розрахункової формули для розв'язання практичних завдань);	50-80 %
4	Відповідь повна, але містить грубі помилки (або	30-50 %

	вирішення практичних завдань білету містить грубі помилки, розрахункові формули для розв'язання практичних завдань містять помилки)	
5	Неповна відповідь з суттєвими помилками	5-30 %
6	Невірна відповідь	0-5 %
7	Відсутня відповідь на теоретичне питання (або відсутнє вирішення практичних завдань білету)	0 %

9. Рекомендована література

Основна література

1. Pathria R.K., Beale P.D. Statistical mechanics, 3ed., Elsevier, 2011, 718 p.
2. Reif F., Fundamentals of Statistical and Thermal Physics. Wavelend Press, 2009, 651 p.
3. Atland A., Simons B., Condensed Matter Field Theory, Cambridge, 2010, 770 p.
4. Gould H., Tobochnik J., Christian W., An Introduction to Computer Simulation methods. CreateSpace Independent Publishing Platform (3rd ed), 2017, 814 p.
5. Pang T., An Introduction to Computational Physics. Cambridge University Press, 2006, 402 p.
6. Thijssen J.M., Computational Physics. Cambridge University Press, 1999, 560 p.
7. Frenkel D., Smit B., Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Elsevier, 2002, 638 p.
8. Haile J.M., Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley & Sons, 1997, 512 p.
9. Becca F., Sorella S., Quantum Monte Carlo Approaches for Correlated Systems. Cambridge University Press, 2017, 274 p.

Допоміжна література

1. Allen M.P, Tildesley D.J., Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, 2017, 400 p.
2. Leach A., Molecular Modeling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001, 771 p.
3. Сотніков А.Г. Першопринципні та середньопольові теоретичні підходи до опису близькокритичних явищ у квантових газах: Дис. на здобуття наукового ступеня доктора наук / ННЦ Харківський фізико-технічний інститут. Харків, 2020. 328 с.
4. Bloch I., Dalibard J., Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases. Rev. Mod. Phys., Vol. 80, 2008. P. 885–964.
5. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. Rev. Mod. Phys. 1996. Vol. 68. P. 13–125.

6. Verstraete, F., Murg, V., Cirac, J.I. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Advances in Physics*. 57 (2). 2008, P. 143–224.

Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Phase transitions on lattices, <https://ibiblio.org/e-notes/Perc/contents.htm>
2. Materials modeling and computer simulation codes, http://www.sklogwiki.org/SklogWiki/index.php/Materials_modelling_and_computer_simulation_codes
3. Molecular dynamics simulation of water, <https://www.youtube.com/watch?v=x8Atqz5YvzQ>
4. QuSpin – an open source Python package for exact diagonalisation and dynamics of quantum many-body systems, <https://mgbukov.github.io/quspin/2016/09/01/quspin.html>
5. ITensor – High-performance tensor software inspired by tensor diagrams, <https://itensor.org/>
6. Quantum Monte Carlo simulator, <https://nanohub.org/tools/qwalk>.