

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. Фейманівський інтеграл за траєкторіями. Підхід світової лінії для бозонних систем. Проблема ферміонного знаку. Варіаційний підхід Монте-Карло для аналізу динаміки квантових систем.