**Санкт-Петербургский государственный университет**

**Р А Б О Ч А Я П Р О Г Р А М М А**

**УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Специальный семинар по методам расчета функциональных интегралов и решеточных моделей

Seminar on Methods of Computation of Functional Integrals and Lattice Models

**Язык(и) обучения**

русский

Трудоемкость в зачетных единицах: 2

Регистрационный номер рабочей программы: 030568

**Раздел 1. Характеристики учебных занятий**

**1.1. Цели и задачи учебных занятий**

Освоение методов расчета функциональных интегралов и решеточных моделей. Применение указанных методов к задачам статистической физики.

**1.2. Требования подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)**

Знание статистической физики, базовые знания по программированию.

**1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)**

Знание методов расчета функциональных интегралов и решеточных моделей, пределов их применения, физических основ. Умение их применять для моделированию физических систем. Навыки в написании программ по расчету функциональных интегралов и решеточных моделей.

**1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий**

Семинары, которые включают написание вычислительных программ. Промежуточная аттестация (ауд.).

**Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий**

**2.1. Организация учебных занятий**

**2.1.1 Основной курс**

|  |
| --- |
| Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся  |
| Код модуля в составе дисциплины,  практики и т.п. | Контактная работа обучающихся с преподавателем | Самостоятельная работа | Объём активных и интерактивных форм учебных занятий | Трудоёмкость |
| лекции | семинары | консультации | практические занятия | лабораторные работы | контрольные работы | коллоквиумы | текущий контроль | промежуточная аттестация | итоговая аттестация | под руководствомпреподавателя | в присутствии преподавателя | сам. раб. с использованиемметодических материалов | текущий контроль (сам.раб.) | промежуточная аттестация (сам.раб.) | итоговая аттестация (сам.раб.) |
| ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ |
| Форма обучения: очная |
| Семестр 3 |  | 30 | 2 |  |  |  |  |  | 2 |  |  | 24 |  |  | 14 |  | 34 | 2 |
|  |  | 2-10 | 2-10 |  |  |  |  |  | 2-10 |  |  | 1-10 |  |  | 1-1 |  |  |  |
| ИТОГО |  | 30 | 2 |  |  |  |  |  | 2 |  |  | 24 |  |  | 14 |  | 34 | 2 |

|  |
| --- |
| Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации |
| Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п. | Формы текущего контроля успеваемости | Виды промежуточной аттестации | Виды итоговой аттестации(только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ) |
| Формы  | Сроки | Виды | Сроки | Виды | Сроки |
| ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ |
| Форма обучения: очная |
| Семестр 3 |  |  | зачёт, устно, традиционная форма | по графику промежуточной аттестации |  |  |

**2.2. Структура и содержание учебных занятий**

1. Методы расчета функциональных интегралов.

Интегралы по траекториям в квантовой статистической физике. Матрица плотности. Метод вершин. Метод Монте-Карло для интегралов по траекториям. Метод Фурье. Использование алгоритма Ванга-Ландау. Реализация рассмотренных методов на примере гармонического осциллятора. Написание кода программ. Расчет энергии системы. Изучение зависимости энергии системы от температуры, других начальных параметров и параметров моделирования.

2. Методы расчета решеточных моделей.

Модель Изинга. Модель Гейзенберга. Моделирование ферромагнетиков. Алгоритм Метрополиса. Восприимчивость. Теплоемкость. Критические индексы. Кластерный метод Вольфа. Реализация рассмотренных методов на примере трехмерной модели Изинга. Написание кода программ. Расчет энергии системы. Изучение зависимости энергии системы от температуры, других начальных параметров и параметров моделирования.

**Раздел 3. Обеспечение учебных занятий**

**3.1. Методическое обеспечение**

**3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины**

Дисциплина состоит из двух частей (см. раздел 2.2). Каждая часть содержит теоретический материал, необходимый для освоения дисциплины, и практические задания. На занятиях обсуждается теоретический материал. По мере выполнения практических заданий студент демонстрирует преподавателю работоспособность программ и совпадение результатов расчетов с известными теоретическими результатами. По мере выполнения двух частей дисциплины студент представляет отчеты. В отчете должны содержаться основные результаты и выводы по предложенным заданиям. Примеры заданий приведены в пункте 3.1.4.

**3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы**

Студентам выдаются описания по двум разделам дисциплины. Каждое описание содержит теоретический материал, необходимый для освоения дисциплины, и практические задания.
Основная и дополнительная литература, иные информационные источники.

**3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания**

Методика проведения зачета.

Зачет выставляется по результатам работы в семестре.

Для получения отметки «зачтено» необходимо, чтобы были написаны три программы по первой части курса (метод вершин, метод Фурье, алгоритм Ванга - Ландау) и две программы по второй части курса (трехмерная модель Изинга, кластерный метод Вольфа). Все программы должны работать корректно. Результаты расчетов должны демонстрировать хорошее совпадение с известными теоретическими результатами. Должны быть подготовлены два отчета: по одному на каждую часть курса.

**3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)**

Примеры контрольных вопросов и заданий.

1. Методы расчета функциональных интегралов

Задание 1. Выполните расчет энергии квантового осциллятора методом вершин при следующих значениях параметров: n = 5, Emax = 50, dx = 1.5, D = 3, NMC = 107. Получите зависимость энергии от обратной безразмерной температуры b. В качестве значений обратной температуры можно взять b = 0.25, 0.5, 1, 2, 4. Выполните сравнение полученной зависимости с известным выражением для энергии квантового осциллятора E = D/2 coth(b/2).

Задание 2. Поменяйте значения параметров n, dx, NMC. Как эти изменения сказываются на скорости и точности выполнения вычислений?

Задание 3. Выполните расчет энергии квантового осциллятора с помощью алгоритма Ванга - Ландау. Получите зависимость энергии от обратной безразмерной температуры b. В качестве значений обратной температуры можно взять b = 0.25, 0.5, 1, 2, 4. Выполните сравнение полученной зависимости с известным выражением для энергии квантового осциллятора E = D/2 coth(b/2).

Задание 4. Объясните увеличение отклонения результатов расчёта для b = 0.25 и b = 4. Подберите параметры расчёта для улучшения совпадения результатов численных вычислений с аналитическими результатами.

Задание 5. Выполните расчет энергии квантового осциллятора с помощью метода Фурье. Получите зависимость энергии от обратной безразмерной температуры b. В качестве значений температуры можно взять b = 0.25, 0.5, 1, 2, 4. Выполните сравнение полученной зависимости с известным выражением для энергии квантового осциллятора E = D/2 coth(b/2).

Задание 6. Поменяйте значения параметров Nf, da, NMC. Как эти изменения сказываются на скорости и точности выполнения вычислений?

Задание 7. Реализуйте моделирование, используя параллельные вычисления.

2. Методы расчета решеточных моделей.

Задание 1. Определите набор входных параметров для моделирования методом Монте-Карло модели Изинга для ферромагнетика. Выполните обезразмеривание уравнений и начальных параметров.

Задание 2. Составьте программу моделирования методом Монте-Карло модели Изинга в простой кубической решетке (d = 3, число ближайших соседей равно 6).

Задание 3. Выполните программу. Вычислите средние теплоемкость и восприимчивость для значений величины kBT/J в диапазоне от 3.0 до 7.0 с шагом 0.2 для различных значений длины ребра решетки L = 4, 8, 16, 32 узлов. Для расчета средних значений используйте n такое, чтобы на спин приходилось 1000 шагов Монте-Карло после установления равновесия. Оцените температуру фазового перехода Tc(L) по максимуму теплоемкости и восприимчивости.

Задание 4. Какая температура Tc сильнее зависит от L — найденная из C(T) или из (T )? Используйте те значения Tc(L), которые сильнее зависят от L, постройте график Tc(L) как функции L −1/ν для разных значений ν в диапазоне от 0.5 до 1.0. Покажите, что экстраполированное значение Tc(L = ∞) почти не зависит от величины ν. Сравните свою оценку для Tc бесконечной системы с наилучшим известным значением kBTc/J = 4.51.

Задание 5. Вычислите средние намагниченность, теплоемкость и восприимчивость для L = 4, 8, 16, 32 в простой кубической решетке. Оцените отношения критических индексов , , . Сравните значения критических индексов с известными из теоретических расчетов.

**3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса**

Оценка обучающимися содержания и качества учебного процесса по дисциплине  осуществляется в установленном в СПбГУ порядке.

**3.2. Кадровое обеспечение**

**3.2.1 Образование и (или) квалификация штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий**

Преподаватели должны иметь высшее образование и свободно владеть материалами дисциплины.

**3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом**

Персонал, обеспечивающий: функционирование дисплейного класса, установку необходимого программного обеспечения, создание профилей пользователей для студентов.

**3.3. Материально-техническое обеспечение**

**3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий**

Дисплейный класс с необходимым количеством посадочных мест, оборудованный проектором и белой маркерной доской.

**3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования**

Компьютеры с установленной операционной системой Linux или аналогами и графическим интерфейсом пользователя. Компьютеры с многоядерными (2-х или 4-х ядерными) процессорами. Выход в сеть Интернет.

**3.3.3 Характеристики специализированного оборудования**

Не требуется.

**3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения**

Пакеты программ (лицензия GNU GPL): gcc, ssh, gnuplot, mc, gsl, gedit, eclipse, LibreOffice.

**3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов**

Маркеры для белых досок — 2 шт. Губка. Бумага формата А4 для распечатки материалов для самостоятельной работы.

**3.4. Информационное обеспечение**

**3.4.1 Список обязательной литературы**

1. Р. Фейнман, А. Хибс Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир 1968; или Новокузнецк: Новокузнецкий физико-математический институт, 1998.
2. Р. Фейнман, Статистическая механика, М.: Платон, 2000.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц Статистическая физика. Часть 1. М.: Физматлит, 2001.

**3.4.2 Список дополнительной литературы**

В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, П.В. Прудников Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: Физматлит, 2009.
2. Х. Гулд, Я. Тобочник Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990. т.1,2.
3. Д. В. Хеерман Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990.
4. Д. Френкель, Б. Смит Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: Научный мир, 2013. (перевод: D. Frenkel, B. Smit Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. San Diego, Academic Press, 2002.)
5. F. Wang, D. P. Landau Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. Phys. Rev. Lett., 2001, v. 86, pp. 2050–2053.
6. Д. Н. Колисниченко Linux: От новичка к профессионалу. СПб.: БХВ-Петербург, 2011.

**3.4.3 Перечень иных информационных источников**

1. Учебные материалы, размещенные на сайте http://stat.phys.spbu.ru/
2. А. Ю. Захаров Функциональные методы в классической статистической физике:
Учеб.–метод. пособие / НовГУ им. Ярослава Мудрого. — Великий Новгород,
2006.
3. А. Ю. Захаров Решеточные модели статистической физики: Учеб.–метод. пособие /
НовГУ им. Ярослава Мудрого. — Великий Новгород, 2006.
4. Numerical Recipes in C, Second Edition (1992) http://www.nrbook.com/a/bookcpdf.php

**Раздел 4. Разработчики программы**

Аксенова Елена Валентиновна, профессор кафедры статистической физики, 428-45-15, e.aksenova@spbu.ru