

## Программа учебной дисциплины «Модели сложных систем»

Утверждена

Академическим советом ОП

Протокол № от \_\_.\_\_.20\_\_

Разработчик	Соколик А.А., доцент, Департамент прикладной математики МИЭМ
Число кредитов	5
Контактная работа (час.)	60
Самостоятельная работа (час.)	130
Курс, Образовательная программа	2-й курс, «Математические методы моделирования и компьютерные технологии»
Формат изучения дисциплины	Без использования онлайн-курса

### 1. Цель, результаты освоения дисциплины и пререквизиты

Дисциплина «Модели сложных систем» направлена на ознакомление студентов с основными моделями сложных систем, изучаемых в современной квантовой и статистической физике и применяемых для решения как фундаментальных, так и прикладных задач. Учебный курс охватывает современные вычислительные методы и модели, используемые в квантовой механике атомов, молекул, наноструктур и конденсированных сред, основные модели современной статистической физики малых систем, стохастической и квантовой термодинамики, а также модели, применяемые в статистической физике фазовых переходов.

Для изучения курса студенты должны иметь базовые знания квантовой механики и статистической физики.

### 2. Содержание учебной дисциплины

#### Разбиение дисциплины на темы и объем учебных занятий в часах

№	Название раздела	Всего часов	Аудиторные часы		Самостоятельная работа
			Лекции	Семинары	
1	Методы моделирования в квантовой механике	66	9	12	45
2	Стохастическая и квантовая термодинамика	65	9	11	45

3	Статистическая физика фазовых переходов	59	8	11	40
	<b>Итого:</b>	<b>190</b>	<b>26</b>	<b>34</b>	<b>130</b>

### Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Методы моделирования в квантовой механике.

Теория возмущений. Вариационный метод. Приближение среднего поля, уравнения Хартри-Фока. Метод функционала плотности, теоремы Хоэнберга-Кона и метод Кона-Шема. Нестационарная теория функционала плотности. Вариационный метод Монте-Карло. Метод мнимого времени. Квантовый диффузионный метод Монте-Карло. Монте-карловское интегрирование по путям. Моделирование сверхтекучих систем бозонов. Проблема знака в случае фермионов. Квантовый отжиг как метод решения оптимизационных задач. Искусственные нейронные сети, сети Хопфилда и машины Больцмана. Использование нейронных сетей для определения основного состояния и временной эволюции квантовых систем.

Тема 2. Стохастическая и квантовая термодинамика.

Статистические ансамбли и энтропия. Разделение теплоты и работы. Производство и поток энтропии. Термодинамика неравновесных систем в установившемся состоянии. Равенство Ярзинского, соотношение Крукса, другие детальные и интегральные флуктуационные теоремы. Термодинамические протоколы и их обратимость. Траекторная термодинамика. Демон Максвелла и двигатель Сциларда. Термодинамические протоколы с обратной связью и обобщенные флуктуационные теоремы. Принцип Ландауэра. Связь термодинамики и информации. Использование информации для повышения эффективности тепловых машин. Аппарат матрицы плотности. Квантовая запутанность и декогеренция. Квантовая стохастическая термодинамика, роль процессов измерения. Квантовые флуктуационные теоремы. Извлечение работы из квантовых систем. Ресурсная формулировка термодинамики. Квантовые корреляции как термодинамический ресурс. Квантовые тепловые машины.

Тема 3. Статистическая физика фазовых переходов.

Фазовые переходы, параметр порядка и критические индексы. Универсальность фазовых переходов. Модель Изинга, XY-модель, модель Поттса. Приближение среднего поля. Тепловые флуктуации параметра порядка. Корреляционная длина. Топологические дефекты, механизм Киббла-Цюрека. Корреляционные функции параметра порядка и их вычисление при помощи функциональных интегралов. Гауссово приближение и пределы его применимости. Верхняя и нижняя критические размерности. Квазидальний порядок в двумерных системах, переход Березинского-Костерлица-Таулеса. Квантовые фазовые переходы. Масштабные преобразования.

Ренорм-групповые потоки и фиксированные точки. Ренорм-группа в координатном и импульсном представлениях. Размерная регуляризации и эpsilon-разложение.

### 3. Оценивание

Оценивание знаний студентов включает два элемента контроля: текущий контроль и итоговый экзамен. Блокирующие элементы контроля не предусмотрены.

Текущий контроль предусматривает письменные самостоятельные работы, выполняемые студентами в начале каждого занятия (за исключением первого). В этих работах студент должен продемонстрировать усвоение основных понятий, изложенных на предыдущем занятии, а также знание описанных на лекциях и разобранных на семинарах физических моделей и областей их применения. Оценка за каждую из 15 самостоятельных работ  $O_n$ , где  $n$ -номер работы, вычисляется как число 10, умноженное на долю правильных ответов.

Оценка за текущий контроль вычисляется как округленное до целого числа баллов среднее арифметическое оценок за все самостоятельные работы:

$$O_{\text{текущ}} = (O_1 + O_2 + \dots + O_{15})/15.$$

Итоговый экзамен проводится в конце 2-го модуля. На экзамене студент должен продемонстрировать знание основных понятий, представление о физических моделях по всем темам данного курса и умение с ними работать. Экзамен проводится в устной форме. В билете на экзамене содержатся 2 темы, каждая из которых состоит из ряда теоретических вопросов. На подготовку к ответу выделяется 60 минут. Оценка за экзамен выставляется как доля вопросов, на которые студентом дан правильный ответ, умноженная на 10 баллов и округленная до целого числа.

Итоговая оценка за дисциплину вычисляется как округленная до целого числа баллов полусумма

$$O_{\text{итог}} = 0,5 O_{\text{текущ}} + 0,5 O_{\text{экзамен}}$$

оценки за текущий контроль  $O_{\text{текущ}}$  и оценки за экзамен  $O_{\text{экзамен}}$ .

В случае неудовлетворительной оценки, полученной студентом на экзамене, экзамен подлежит пересдаче.

Перевод десятибалльной оценки в пятибалльную осуществляется в соответствии со следующей таблицей:

По десятибалльной шкале	По пятибалльной шкале
1 – неудовлетворительно 2 – очень плохо 3 – плохо	неудовлетворительно – 2
4 – удовлетворительно 5 – весьма удовлетворительно	удовлетворительно – 3
6 – хорошо 7 – очень хорошо	хорошо – 4
8 – почти отлично 9 – отлично 10 – блестяще	отлично – 5

#### 4. Примеры оценочных средств

Примеры вопросов текущего контроля на самостоятельных работах:

- 1) На какой аппроксимации волновой функции многочастичной системы основывается метод Хартри-Фока?
  - 2) Запишите уравнения Хартри-Фока.
  - 3) В чем заключается теорема Хоэнберга-Кона?
  - 4) Как выглядит функционал плотности в приближении локальной плотности?
- 
- 1) Запишите детальную флуктуационную теорему для вероятностей изменения энтропии в ходе прямого и обратного термодинамического протоколов.
  - 2) В чем физический смысл детальной флуктуационной теоремы для изменения энтропии?
  - 3) Запишите интегральную флуктуационную теорему для изменения энтропии.
  - 4) Каким образом из интегральной флуктуационной теоремы для изменения энтропии получается второе начало термодинамики?
- 
- 1) В чем заключается модель Изинга?
  - 2) Для каких фазовых переходов применима модель Изинга?
  - 3) В чем заключается приближение среднего поля при рассмотрении фазового перехода?
  - 4) Что такое корреляционная длина? Как она ведет себя вблизи температуры фазового перехода?

Примеры вопросов для экзамена:

- 1) Метод функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона и универсальный функционал. Функционал в приближении локальной плотности и градиентные поправки. Метод Кона-Шема, схема самосогласованных вычислений.
- 2) Демон Максвелла и двигатель Сциларда. Разрешение парадокса демона Максвелла. Принцип Ландауэра. Термодинамические протоколы с обратной связью. Флуктуационные теоремы для термодинамических протоколов с обратной связью.
- 3) Корреляционные функции параметра порядка. Вычисление корреляционных функций при помощи функциональных интегралов. Гауссово приближение для корреляционных функций. Пределы применимости гауссова приближения, параметр Гинзбурга.

Блокирующие элементы не предусмотрены.

#### 5. Ресурсы

### 5.1. Рекомендуемая основная литература

п/п	Наименование
	В.М. Замалин, Г.Э. Норман, В.С. Филинов, Метод Монте-Карло в статистической термодинамике, Наука, Москва, 1977.
	Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Т. 5 : Статистическая физика: Ч. 1, Физматлит, Москва, 2013.

### 5.2. Рекомендуемая дополнительная литература

п/п	Наименование
	Р. Фейнман, А. Хибс, Квантовая механика и интегралы по траекториям, Мир, Москва, 1968.
	D.J. Amit, Field theory, the renormalization group, and critical phenomena: graphs to computers, World Scientific, New Jersey, 2011.

### 5.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения лекций используются доска и проектор.

## 6. Особенности организации обучения для лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

В случае необходимости, обучающимся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (по заявлению обучающегося) а для инвалидов также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида, могут предлагаться следующие варианты восприятия учебной информации с учетом их индивидуальных психофизических особенностей, в том числе с применением электронного обучения и дистанционных технологий:

1.1.1. для лиц с нарушениями зрения: в печатной форме увеличенным шрифтом; в форме электронного документа; в форме аудиофайла (перевод учебных материалов в аудиоформат); в печатной форме на языке Брайля; индивидуальные консультации с привлечением тифлосурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

1.1.2. для лиц с нарушениями слуха: в печатной форме; в форме электронного документа; видеоматериалы с субтитрами; индивидуальные консультации с привлечением сурдопереводчика; индивидуальные задания и консультации.

1.1.3. для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата: в печатной форме; в форме электронного документа; в форме аудиофайла; индивидуальные задания и консультации.