

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Методы Монте-Карло в статистической физике
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: П.Р. Левашов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании Физтех-кластера академической и научной карьеры 28.01.2022

Аннотация

Курс посвящен теоретическим основам и практическому применению стохастических методов для решения различных задач статистической физики. Рассматриваются основные понятия теории вероятностей и статистической физики, вопросы генерации псевдослучайных чисел на компьютере, специализированные стохастические алгоритмы для атомистического моделирования. Основное внимание в курсе уделяется специфическим вопросам программной реализации методов Монте-Карло, от элементарных задач вычисления определенных интегралов до решения сложных проблем квантовой статистической физики с использованием континуальных интегралов. В процессе обучения будет уделено внимание задаче о перколяции, модели Изинга, атомистическому моделированию систем частиц с классическими потенциалами, методам решения многочастичного стационарного уравнения Шредингера, квантовым многочастичным системам при конечной температуре.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью освоения дисциплины «методы Монте-Карло в статистической физике» является изучение основных законов статистической физики, изучение различных задач классической и квантовой статистической физики и подходов к их решению на основе метода Монте-Карло.

Задачи дисциплины

- получение представлений о круге задач, решаемых в рамках статистической физики;
- изучение основных законов классической и квантовой статистической физики;
- изучение метода Монте-Карло и его приложений к задачам статистической физики;
- моделирование различных классических и квантовых систем;
- вычисление термодинамических и переносных свойств различных систем;
- представление о стохастическом моделировании квантовых систем.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов

ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- распределение Гиббса, формулы для статсуммы в микроканоническом и каноническом ансамблях;
- понятие случайного числа, функции распределения и плотности распределения;
- алгоритм Метрополиса для генерации случайных чисел с заданным распределением;
- формулу Эйнштейна для коэффициента самодиффузии;
- формулы для вычисления термодинамических величин для заданного парного потенциала взаимодействия;
- стационарное уравнение Шредингера.

уметь:

- реализовывать на компьютере алгоритм вычисления определенных интегралов методом Монте-Карло;
- реализовывать алгоритм Метрополиса;
- реализовывать на компьютере модель спиновой динамики в модели Изинга;
- моделировать на компьютере систему атомов, взаимодействующих с заданным парным потенциалом, методом Монте-Карло в каноническом ансамбле;
- численно решать стационарное уравнение Шредингера для заданного потенциала вариационным методом Монте-Карло;
- численно решать стационарное уравнение Шредингера для заданного потенциала диффузионным методом Монте-Карло.

владеть:

- навыками разработки простых алгоритмов, основанных на методах Монте-Карло;
- структурным программированием на языках C/C++ и Python;
- визуализацией результатов моделирования на языке Python;
- подключением сторонних библиотек для реализации алгоритмов, основанных на методе Монте-Карло.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Основные понятия теории вероятностей. Дискретная и непрерывная случайная величина. Функция распределения, плотность вероятности. Примеры случайных величин с различными распределениями	5			4
2	Основные понятия статистической физики. Статсумма, плотность состояний, понятие ансамбля. Примеры	5			4
3	Генераторы псевдослучайных чисел. Типы генераторов, их достоинства и недостатки. Тестирование генераторов псевдослучайных чисел. Программные реализации генераторов псевдослучайных чисел	2			8
4	Понятие метода Монте-Карло. Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Погрешность метода Монте-Карло. Примеры. Алгоритм Метрополиса	2	1		8
5	Метод случайных блужданий. Броуновское движение и диффузия. Блуждание без самопересечений и приложения к физике полимеров	3	2		8
6	Задача о перколяции. Порог перколяции, бесконечный кластер. Алгоритмы поиска бесконечного кластера. Вычисление порога перколяции	3	2		8
7	Модели спиновой динамики. Модель Изинга. Моделирование термодинамических свойств ферромагнетика в двумерной модели Изинга	4	3		8
8	Модель твердых сфер. Задание начальной конфигурации. Вычисление давления системы твердых сфер в зависимости от плотности в одномерном и двумерном случае	2	2		2
9	Применение метода Монте-Карло для квантовых систем. Вариационный метод Монте-Карло для одномерного стационарного уравнения Шредингера	2	2		4
10	Метод случайных блужданий для стационарного уравнения Шредингера. Диффузионный метод Монте-Карло. Алгоритм метода, приложения для модельных систем	1	2		4

11	Понятие о методе Монте-Карло с интегралами по траекториям. Матрица плотности, проблема знаков. Современное состояние проблемы моделирования квантовых систем многих частиц	1	1		2
Итого часов		30	15		60
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основные понятия теории вероятностей. Дискретная и непрерывная случайная величина. Функция распределения, плотность вероятности. Примеры случайных величин с различными распределениями

Основные понятия теории вероятностей. Дискретная и непрерывная случайная величина. Функция распределения, плотность вероятности. Примеры случайных величин с различными распределениями.

2. Основные понятия статистической физики. Статсумма, плотность состояний, понятие ансамбля. Примеры

Основные понятия статистической физики. Статсумма, плотность состояний, понятие ансамбля. Примеры.

3. Генераторы псевдослучайных чисел. Типы генераторов, их достоинства и недостатки. Тестирование генераторов псевдослучайных чисел. Программные реализации генераторов псевдослучайных чисел

Генераторы псевдослучайных чисел. Типы генераторов, их достоинства и недостатки. Тестирование генераторов псевдослучайных чисел. Программные реализации генераторов псевдослучайных чисел.

4. Понятие метода Монте-Карло. Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Погрешность метода Монте-Карло. Примеры. Алгоритм Метрополиса

Понятие метода Монте-Карло. Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Погрешность метода Монте-Карло. Примеры. Алгоритм Метрополиса.

5. Метод случайных блужданий. Броуновское движение и диффузия. Блуждание без самопересечений и приложения к физике полимеров

Метод случайных блужданий. Броуновское движение и диффузия. Блуждание без самопересечений и приложения к физике полимеров.

6. Задача о перколяции. Порог перколяции, бесконечный кластер. Алгоритмы поиска бесконечного кластера. Вычисление порога перколяции

Задача о перколяции. Порог перколяции, бесконечный кластер. Алгоритмы поиска бесконечного кластера. Вычисление порога перколяции.

7. Модели спиновой динамики. Модель Изинга. Моделирование термодинамических свойств ферромагнетика в двумерной модели Изинга

Модели спиновой динамики. Модель Изинга. Моделирование термодинамических свойств ферромагнетика в двумерной модели Изинга.

8. Модель твердых сфер. Задание начальной конфигурации. Вычисление давления системы твердых сфер в зависимости от плотности в одномерном и двумерном случае

Модель твердых сфер. Задание начальной конфигурации. Вычисление давления системы твердых сфер в зависимости от плотности в одномерном и двумерном случае.

9. Применение метода Монте-Карло для квантовых систем. Вариационный метод Монте-Карло для одномерного стационарного уравнения Шредингера

Применение метода Монте-Карло для квантовых систем. Вариационный метод Монте-Карло для одномерного стационарного уравнения Шредингера.

10. Метод случайных блужданий для стационарного уравнения Шредингера. Диффузионный метод Монте-Карло. Алгоритм метода, приложения для модельных систем

Метод случайных блужданий для стационарного уравнения Шредингера. Диффузионный метод Монте-Карло. Алгоритм метода, приложения для модельных систем.

11. Понятие о методе Монте-Карло с интегралами по траекториям. Матрица плотности, проблема знаков. Современное состояние проблемы моделирования квантовых систем многих частиц

Метод случайных блужданий для стационарного уравнения Шредингера. Диффузионный метод Монте-Карло. Алгоритм метода, приложения для модельных систем.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор).

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Теоретическая физика [Текст] : в 10 т. Т. 5, Ч. 1 : Статистическая физика : учеб. пособие для ун-тов / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского .— 5-е изд., стереотип. — М. : Физматлит, 2001, 2002, 2005, 2010 .— 616 с.
2. Компьютерное моделирование в физике [Текст] : в 2 ч. Ч. 1 : [учеб. пособие для вузов] / Х. Гулд, Я. Тобочник ; пер. с англ. А. Н. Полудова, В. А. Панченко .— М. : Мир, 1990 .— 349 с.
3. Компьютерное моделирование в физике [Текст] : в 2 ч. Ч. 2 : [учеб. пособие для вузов] / Х. Гулд, Я. Тобочник ; пер. с англ. А. Н. Полудова, В. А. Панченко .— М. : Мир, 1990 .— 400 с.
4. Прохоров Ю.В., Пономаренко Л.С. Лекции по теории вероятностей и математической статистике. М.: Издательство Московского университета, 2012. 256 с.

Дополнительная литература

1. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике [Текст]/Д. В. Хеерман , -М., Наука, 1990
2. Численные методы Монте- Карло [Текст]/И. М. Соболев, -М., Наука, 1973
3. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, Физматлит, 1995. 144 с.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

1. Текстовый редактор + компилятор языка C/C++ или интегрированная среда разработки на языке C/C++ (CLion, Microsoft Visual Studio, Xcode, ...)
2. Интерпретатор языка Python версии 3 + пакеты numpy, scipy и matplotlib
3. Библиотека вычислительной математики GSL

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры (Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем)
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	П.Р. Левашов, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы Монте-Карло в статистической физике» обучающийся должен:

знать:

- распределение Гиббса, формулы для статсуммы в микроканоническом и каноническом ансамблях;
- понятие случайного числа, функции распределения и плотности распределения;
- алгоритм Метрополиса для генерации случайных чисел с заданным распределением;
- формулу Эйнштейна для коэффициента самодиффузии;
- формулы для вычисления термодинамических величин для заданного парного потенциала взаимодействия;
- стационарное уравнение Шредингера.

уметь:

- реализовывать на компьютере алгоритм вычисления определенных интегралов методом Монте-Карло;
- реализовывать алгоритм Метрополиса;
- реализовывать на компьютере модель спиновой динамики в модели Изинга;
- моделировать на компьютере систему атомов, взаимодействующих с заданным парным потенциалом, методом Монте-Карло в каноническом ансамбле;
- численно решать стационарное уравнение Шредингера для заданного потенциала вариационным методом Монте-Карло;
- численно решать стационарное уравнение Шредингера для заданного потенциала диффузионным методом Монте-Карло.

владеть:

- навыками разработки простых алгоритмов, основанных на методах Монте-Карло;
- структурным программированием на языках C/C++ и Python;
- визуализацией результатов моделирования на языке Python;
- подключением сторонних библиотек для реализации алгоритмов, основанных на методе Монте-Карло.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Критерии оценивания

Оценка "отлично" (10 баллов) выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка "отлично" (9 баллов) выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка "отлично" (8 баллов) выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочётами.

Оценка "хорошо" (7 баллов) выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка "хорошо" (6 баллов) выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка "хорошо" (5 баллов) выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка "удовлетворительно" (4 балла) выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка "удовлетворительно" (3 балла) выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка "неудовлетворительно" (2 балла) выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка "неудовлетворительно" (1 балл) выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.

1. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры заданий контрольной работы:

1. Определение вероятности, случайная величина, дискретные и непрерывные случайные величины.
2. Функция распределения и плотность вероятности случайной величины. Математическое ожидание и дисперсия.
3. Распределение Гиббса и его частные случаи: распределение Больцмана, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.
4. Микроканонический и канонический ансамбли, статистическая сумма, пример идеального газа.
5. Линейный конгруэнтный генератор псевдослучайных чисел, его свойства, достоинства и недостатки.

Примеры задач из домашнего задания:

1. Задано M точек в единичном круге. За 1 шаг каждая точка равновероятно смещается в одном из 4-х направлений (на квадратной решетке) на единичный шаг. Вычислить среднеквадратичный размер облака точек через N шагов и определить его зависимость от числа шагов. Среднеквадратичный размер вычислять по формуле:

$$R_N = \sqrt{\langle \Delta R_N^2 \rangle}, \langle \Delta R_N^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle + \langle y_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 - \langle y_N \rangle^2$$

2. Задано M точек в единичном круге. За 1 шаг каждая точка равновероятно смещается в одном из 6 направлений (на треугольной решетке) на единичный шаг. Вычислить среднеквадратичный размер облака точек через N шагов и определить его зависимость от числа шагов. Среднеквадратичный размер вычислять по формуле:

$$R_N = \sqrt{\langle \Delta R_N^2 \rangle}, \langle \Delta R_N^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle + \langle y_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2 - \langle y_N \rangle^2$$

3. Определить пространственное распределение положений частицы, производящей случайные блуждания на единичный шаг в случайном направлении. Частица смещается из точки с координатами $(0, 0)$, максимальное радиальное смещение не превышает 5. Сделать 5000 шагов и вывести гистограмму распределения.
4. Промоделировать падение дождевой капли. Капля падает с высоты H , координата по оси $x = 0$. Далее капля смещается влево, вправо, вниз или вверх со следующими вероятностями: $p_l = p_r = 0.2$, $p_d = 0.5$, $p_u = 0.1$. Определить среднее число шагов до падения капли. Определить зависимость среднего числа шагов от высоты H и вывести ее в виде графика.

2. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов

1. Определение вероятности, случайная величина, дискретные и непрерывные случайные величины.
2. Функция распределения и плотность вероятности случайной величины. Математическое ожидание и дисперсия.
3. Понятие диффузии и броуновского движения. Формула Эйнштейна для коэффициента самодиффузии.
4. Сформулировать понятия перколяции, бесконечного кластера и порога перколяции
5. Понятие ансамбля, микроканонический и канонический ансамбли, статистическая сумма

Примеры контрольных заданий

1. Описать алгоритм генерации случайных чисел с плотностью нормального распределения и выполнить его программную реализацию.
2. Написать программу, осуществляющую проверку центральной предельной теоремы.
3. На основе модели Эйнштейна для твердого тела оценить число частиц, необходимых для выполнения аддитивности энтропии с точностью 0.1% при разбиении системы частиц на две равные части.
4. Реализовать алгоритм Метрополиса для генерации последовательности случайных чисел с плотностью распределения $\cos(x^2)$.
5. Получить гауссово распределение $p(x) = A \exp(-x^2/2\sigma^2)$ с помощью алгоритма Метрополиса. Для этого

смоделировать одномерные случайные блуждания с некоторым максимальным шагом d . Вывести гистограмму распределения.

Примеры экзаменационных билетов

Билет 1.

1. Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Погрешность метода Монте-Карло.
2. Перколяция, бесконечный кластер и порог перколяции. Моделирование перколяции.

Билет 2.

1. Дискретная и непрерывная случайная величина. Функция распределения, плотность вероятности.
2. Понятие диффузии и броуновского движения. Вывод формулы Эйнштейна для коэффициента самодиффузии.

Билет 3.

1. Статсумма, плотность состояний, понятие ансамбля. Статсумма идеального газа
2. Алгоритм Метрополиса, его теоретическое обоснование.

Билет 4.

1. Распределение Гиббса и его частные случаи: распределение Больцмана, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.
2. Парная корреляционная функция и алгоритм для ее нахождения.

Билет 5.

1. Понятие матрицы плотности, матрица плотности для канонического ансамбля.
2. Формулы для расчета давления и энергии при атомистическом моделировании с классическим парным потенциалом.