

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

«Утверждаю»

Декан факультета ВМК МГУ
имени М.В. Ломоносова



Е.И. Моисеев

« » _____ 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
«Вариационные методы в вычислительной физике»**

Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

Направление подготовки – 01.06.01 «Математика и механика»

Направленность (профиль) – «Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление» (01.01.02),

«Теория вероятностей и математическая статистика» (01.01.05),

«Дискретная математика и математическая кибернетика» (01.01.09),

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (05.13.18)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

1. НАИМЕНОВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Вариационные методы в вычислительной физике

2. УРОВЕНЬ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ, НАПРАВЛЕННОСТЬ (ПРОФИЛЬ) ПОДГОТОВКИ

Направление 01.06.01 «Математика и механика». Направленность (профиль) «Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление» (01.01.02), «Теория вероятностей и математическая статистика» (01.01.05), «Дискретная математика и математическая кибернетика» (01.01.09), «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (05.13.18)

4. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОСНОВНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина относится к специальным дисциплинам вариативной части образовательной программы.

5. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

Дисциплина участвует в формировании следующих компетенций образовательной программы:

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения
Владением методологией теоретических и экспериментальных исследований в области профессиональной деятельности (ОПК-1)	З1 (ОПК-1) ЗНАТЬ: современные математические методы, применяющиеся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий У1 (ОПК-1) УМЕТЬ: применять современные методы постановки и анализа задач в области математики и информатики В1 (ОПК-1) ВЛАДЕТЬ: навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики

<p>Владение современными методами построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач, а также методами разработки и реализации алгоритмов их решения на основе фундаментальных знаний в области математики и информатики (ПК-1)</p>	<p>З1 (ПК-1) ЗНАТЬ: Современные методы построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.</p> <p>У1 (ПК-1) УМЕТЬ: Применять современные методы построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.</p> <p>В1 (ПК-1) ВЛАДЕТЬ: навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.</p>
<p>Способность к реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов, ориентированных на современную вычислительную технику (ПК-4)</p>	<p>З1 (ПК-4) ЗНАТЬ: современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов, особенности современных вычислительных комплексов</p> <p>У1(ПК-4) УМЕТЬ: применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов</p> <p>В1 (ПК-4) ВЛАДЕТЬ: навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих особенности современных вычислительных комплексов</p>

--	--

Оценочные средства для промежуточной аттестации приведены в Приложении.

6. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов.

40 часов составляет контактная работа с преподавателем – 36 часа занятий лекционного типа, 0 часов занятий семинарского типа (семинары, научно-практические занятия, лабораторные работы и т.п.), 0 часов индивидуальных консультаций, 0 часов мероприятий текущего контроля успеваемости, 2 часа групповых консультаций, 2 часа мероприятий промежуточной аттестации.

68 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. ВХОДНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Учащиеся должны владеть знаниями по линейной алгебре, математическому анализу и обыкновенным дифференциальным уравнениям, соответствующим основным образовательным программам бакалавриата по укрупненным группам направлений и специальностей 01.00.00 «Математика и механика» или 02.00.00 «Компьютерные и информационные науки».

8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Процесс обучения состоит из обсуждения теории, разбора задач и выполнения домашних контрольных работ. В конце семестра проводится устный экзамен в виде презентации решенных задач.

9. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В спецкурсе излагается метод функций Грина в многоэлектронной задаче и его приложения для исследования свойств материалов. Рассматриваются приближенные методы, основанные на вариационных принципах квантовой механики и статистической физики. Излагаются подходы к вычислению интегралов в различных моделях статистической физики с помощью метода седловой точки и оптимального гауссова приближения. В качестве приложения рассматриваются расчеты магнитных характеристик металлов и сплавов при конечных температурах. Обсуждается использование пространственных и временных корреляционных функций в теории и эксперименте. Все необходимые сведения из квантовой механики и статистической физики даются в рамках курса.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы						Самостоятельная работа обучающегося, часы		
		из них						из них		
Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего		
Тема 1. Вариационные принципы в модели Изинга. Кристаллическая решетка, циклические краевые условия. Гамильтониан, статистическая сумма и свободная энергия. Метод седловой точки. Преобразование Стратоновича-Хаббарда. Принцип минимума свободной энергии. Оптимальное гауссово приближение в модели Изинга.	8	4	-	-	-	0	4	4	-	4
Тема 2. Функция отклика.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8

Преобразование Фурье в пространстве и времени. Соотношения симметрии. Аналитические свойства: соотношения Крамерса-Кронига. Преобразование Гильберта.										
Тема 3. Элементы квантовой механики. Квантование. Наблюдаемые величины и их вероятности. Стационарные состояния. Одновременная измеримость, принцип неопределенности. Оператор кинетического момента. Спин электрона. Матрицы Паули. Магнитный момент.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8
Тема 4. Теория линейного отклика. Матрица плотности. Уравнение Лиувилля. Формула Кубо. Флуктуационно-диссипационная теорема. Закон Кюри-Вейсса.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8
Тема 5. Многоэлектронная задача. Уравнение Шредингера с периодическим потенциалом. Функции Блоха и Ваннье. Система тождественных частиц. Вторичное квантование. Операторы рождения и уничтожения. Выражения для операторов энергии, зарядовой и	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8

спиной плотностей. Система взаимодействующих электронов. Статистика Ферми.										
Тема 6. Теория среднего поля. Приближение среднего поля. Гамильтониан Хаббарда. Модель Хартри-Фока и обменное взаимодействие в металлах. Теория среднего поля Стонера. Асимптотики при низких температурах. Закон T^2 для намагниченности.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8
Тема 7. Приближение случайных фаз. Магнитная восприимчивость. Полюса и линии разреза. Спиновые волны и стонеровские возбуждения. Закон $T^{3/2}$ для намагниченности.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8
Тема 8. Квантовые функции Грина. Запаздывающие и опережающие функции Грина. Уравнения движения. Спектральная плотность. Температурная функция Грина. Аналитическое продолжение. Правила сумм.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8
Тема 9. Корреляционные функции.	12	4	-	-	-	0	4	8	-	8

Пространственные и временные корреляции. Нейтронное рассеяние. Сечение рассеяния. Золотое правило Ферми. Формула Орнштейна-Цернике. Распределение Коши-Лоренца. Времена релаксации.											
Промежуточная аттестация – устный экзамен	2	2					0				
Итого	108	40					68				

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ УЧАЩИХСЯ

Самостоятельная работа учащихся состоит в изучении лекционного материала, учебно-методической литературы, подготовки к текущему контролю и промежуточной аттестации.

Литература для самостоятельной работы студентов в соответствии с тематическим планом.

Тема 1. «Вариационные принципы в модели Изинга» [9].

Тема 2. «Функция отклика» [8].

Тема 3. «Элементы квантовой механики» [1,2].

Тема 4. «Теория линейного отклика» [8].

Тема 5. «Многоэлектронная задача» [5,6].

Тема 6. «Теория среднего поля» [4-6].

Тема 7. «Приближение случайных фаз» [8].

Тема 8. «Квантовые функции Грина» [5-8].

Тема 9. «Корреляционные функции» [3,8,9].

11. РЕСУРСНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Основная литература

1. Коэн-Таннуджи К., Диу Б., Лалоз Ф. Квантовая механика. Том 1. Екатеринбург: УрГУ, 2000.
2. Савельев И.В. Основы теоретической физики. Том 2. Квантовая механика. 4-е изд. М.:Лань, 2016.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 5. Статистическая физика. 6-е изд. М.: Физматлит, 2013.
4. Зинн-Жюстен Ж. Континуальный интеграл в квантовой механике. М.: Физматлит, 2006.
5. Реймс С. Теория многоэлектронных систем. М.: Мир. 1976.
6. Bruus H., Flensberg K. Many-body quantum theory in condensed matter physics. Oxford: Oxford Univ. Press, 2004.
7. Doniach S., Sondheimer E.H. Green's Functions for Solid State Physicists. 2nd edn. London: Imperial College Press, 1998.
8. Kim D.J. New Perspectives in Magnetism of Metals. New York: Kluwer/Plenum, 1999.
9. Melnikov N.B., Reser B.I. Magnetism of Metals in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory, Phys. Met. Metallogr. **117**(13), 1328 (2016)

Дополнительная литература

1. Маттук Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. М.: Мир: 1969.
2. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975.

Информационные технологии, используемые в процессе обучения

1. Программное обеспечение для создания и просмотра pdf-документов Adobe Reader.
2. Издательская система LaTeX.

Материально-техническая база

Для преподавания дисциплины требуется класс, оборудованный маркерной или меловой доской и проектором.

12. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Русский

13. РАЗРАБОТЧИК ПРОГРАММЫ, ПРЕПОДАВАТЕЛИ

доцент, д.ф.-м.н. Мельников Николай Борисович

**ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
«Вариационные методы в вычислительной физике»**

Средства для оценивания планируемых результатов обучения, критерии и показатели оценивания приведены ниже.

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) <i>(критерии и показатели берутся из соответствующих карт компетенций, при этом пользуются либо традиционной системой оценивания, либо БРС)</i>					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
	1	2	3	4	5	
	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	
ЗНАТЬ: современные математические методы, применяющиеся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий Код 31 (ОПК-1)	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных математических методах, применяющихся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий	В целом сформированные, но неполные знания о современных математических методах, применяющихся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных математических методах, применяющихся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий	Сформированные систематические знания о современных математических методах, применяющихся для решения задач в области естественных наук, экономики, социологии и информационно-коммуникационных технологий	Устный экзамен
УМЕТЬ: применять современные методы поста-	Отсутствие умений	Фрагментарные умения применять современные методы	В целом успешное, но не систематическое	Успешное, но содержащее отдельные	Сформированное умение применять современные методы	Устный экзамен

новки и анализа задач в области математики и информатики Код У1 (ОПК-1)		постановки и анализа задач в области математики и информатики	умение применять современные методы постановки и анализа задач в области математики и информатики	пробелы умение применять современные методы постановки и анализа задач в области математики и информатики	постановки и анализа задач в области математики и информатики	
ВЛАДЕТЬ: навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики Код В1 (ОПК-1)	Отсутствие навыков	Фрагментарное владение навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики	В целом успешное, но не полное владение навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики	Успешное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики	Сформированное владение навыками оптимального выбора современных методов и средств постановки и анализа задач в области математики и информатики	реферат
ЗНАТЬ: Современные методы построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях. Код З1 (ПК-1)	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных методах построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	В целом сформированные, но неполные знания о современных методах построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задачи и основанных на дифференциальных уравнениях.	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных методах построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	Сформированные систематические знания о современных методах построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	Устный экзамен
УМЕТЬ: Применять современные методы по-	Отсутствие умений	Фрагментарные умения применять современные методы	В целом успешное, но не систематическое	Успешное, но содержащее отдельные	Сформированное умение применять современные методы	Контрольные работы

строения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях. Код У1 (ПК-1)		построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	умение применять современные методы построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	пробелы умение применять современные методы построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	
ВЛАДЕТЬ: навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях. Код В1 (ПК-1)	Отсутствие навыков	Фрагментарное владение навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	В целом успешное, но не полное владение навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	Успешное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	Сформированное владение навыками выбора современных методов построения и анализа математических моделей, возникающих при решении естественнонаучных задач и основанных на дифференциальных уравнениях.	Контрольные работы, реферат
ЗНАТЬ: современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов, особенности современных вычис-	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных методах реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов, особенно-	В целом сформированные, но неполные знания о современных методах реализации различных математических алгоритмов в виде	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных методах реализации различных математических алго-	Сформированные систематические знания о современных методах реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплек-	Устный экзамен

<p>лительных комплексов Код 31 (ПК-4)</p>		<p>стях современных вычислительных комплексов</p>	<p>программных комплексов, особенностях современных вычислительных комплексов</p>	<p>ритмов в виде программных комплексов, особенностях современных вычислительных комплексов</p>	<p>сов, особенностях современных вычислительных комплексов</p>	
<p>УМЕТЬ: применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов Код У1 (ПК-4)</p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Фрагментарные умения применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое умение применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов</p>	<p>Успешное, но содержащее отдельные пробелы умение применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов</p>	<p>Сформированное умение применять современные методы реализации различных математических алгоритмов в виде программных комплексов с учетом особенностей современных вычислительных комплексов</p>	<p>отчет</p>
<p>ВЛАДЕТЬ: навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих особенности современных вычислительных комплексов Код В1 (ПК-4)</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное владение навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих особенности современных вычислительных комплексов</p>	<p>В целом успешное, но не полное владение навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих особенности</p>	<p>Успешное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих</p>	<p>Сформированное владение навыками оптимального выбора и создания новых современных методов реализации математических алгоритмов в виде программных комплексов, учитывающих особенности современных вычислительных комплексов</p>	<p>отчет</p>

			современных вычислительных комплексов	особенности современных вычислительных комплексов		
--	--	--	---	--	--	--

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Варианты тем для самостоятельного изучения:

1. Электрон в центральном поле. Кулоновский потенциал.
2. Электрон в периодическом поле. Модель Кронига-Пенни.
3. Теория рассеяния. Метод функций Грина.
4. Стационарная теория возмущений. Метод Ритца.
5. Нестационарная теория возмущений. Борновское приближение.
6. Гармонический осциллятор. Гауссово распределение смещений.

Материалы для мероприятий текущего контроля.

Мероприятия текущего контроля реализуются в виде домашних контрольных работ. Решения задач, предлагаемых в контрольных работах, необходимо рассказать на устном экзамене (презентация в Beamer).

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Особенности организации процесса обучения

Для эффективного освоения курса рекомендуется перед каждым занятием привести в порядок конспекты лекций. После каждого занятия рекомендуется найти и прочитать дополнительную литературу по теме лекции и прочитать свои конспекты.

Структура и график контрольных мероприятий

Две домашние контрольные работы в течение семестра, устный экзамен в конце семестра.

Система контроля и оценивания

За каждую контрольную работу выставляется один балл. За презентацию на устном экзамене также выставляется один балл.

Окончательная оценка определяется как сумма баллов за контрольные работы и экзамен (плюс 2).