

FYS-4200 LASKENNALLINEN FYSIIKKA II

Laajuus: 5 op
Luentoja: 40 h
Harjoitustöitä: 4 kpl

Luennoijat: Tapio Rantala, prof., SG219
eMail: Etunimi.Sukunimi@tut.fi
<http://www.tut.fi/~trantala/opetus/>

Harj. töiden ohjaaja: Mikael Kuisma

Aika ja paikka: ti 10 – 12 SG312 Luento
ke 10 – 12 SG312 Luento
to 10 – 12 SG312 Harj.työt

Kirjallisuutta: "paljon",
ks. viiteluettelo jäljempänä

Perustiedot: ohjelmointiympäristö ja -kieli
(ja numeerisia menetelmiä)

Kokeet: Tentti (to) 23.5.2013
ei välikokeita

AIKATAULU kl. 2013

	VIKKO	Luento	Harj.työt	Huom!
	2	ti 1 – 2 ke 3 – 4	to	OSA A
	3	ti 5 – 6 ke 7 – 8	to	
Tammikuu	4	ti 9 – 10	to 1	
	5	ti ke	to 2	
I	6	ti 1 – 2 ke 3 – 4	to 3	OSA B
	7	ti 5 – 6 ke 7 – 8	to	
Helmikuu	8	ti 9 – 10	to 4	
	9	ti ke	to 5	
I	10	Tentti- viikko		
Maaliskuu	11	ti 1 – 2 ke 3 – 4	to –	OSA C
	12	ti 5 – 6 ke 7 – 8	to 6	
I	13	ti 9 – 10 ke	Pääsiäis- viikko	
	14		to	
Huhtikuu	15	ti 1 – 2 ke 3 – 4	to 7	OSA D
	16	ti 5 – 6 ke 7 – 8	to 8	
I	17	9 – 10 ke	to 9	
	18	ti ke	to	
Toukokuu	19	ti ke	to 10	
	20	Tentti- viikko		
	21	Tentti to 23.5.2013		Tentti- viikko

SISÄLTÖ

OSA A MONTE CARLO MENETELMIÄ

1. STATISTISIA PERUSKÄSITTEITÄ	1
1.1. Satunnaisluvut ja satunnaismuuttuja	2
1.2. Tasainen jatkuva jakautuma $Tas(a,b)$	2
1.3. Satunnaislukujakautumien generointi	4
1.4. Jakautuman tunnuslukuja	7
1.5. Eräitä jatkuvia jakautumia	9
1.6. Eräitä diskreettejä jakautumia	14
1.7. Otos	17
2. MONTE CARLO INTEGROINTI	18
2.1. Johdanto	18
2.2. Perusteet	19
2.3. Konvergenssi ja tarkkuus	20
3. MONTE CARLO INTERPOLOINTI	24
3.1. Monimuuttujafunktioiden interpolointi	24
4. SATUNNAISPOLKU (RANDOM WALK)	26
4.1. Peruskäsitteitä	26
4.2. Poissonin yhtälön ratkaiseminen	27
5. YLEISTÄ TIETOKONESIMULOINNEISTA	29
5.1. Johdanto	29
5.2. Käsitteitä	30
5.3. Potentiaalifunktiot	33
6. STOKASTISET SIMULOINTIMENETELMÄT	36
6.1. Perusteita	36
6.2. Brownin dynamiikka (Brownian dynamics)	36
6.3. Metropolis-algoritmi	38
7. MONTE CARLO -OPTIMOINTI	44
7.1. Simuloitu jäähdytys (Simulated annealing)	44
8. PIENIMMÄN NELIÖSUMMAN REGRESSIOMALLI	47
8.1. Peruskäsitteitä	47
8.2. Matriisiesitys	48
8.3. Statistiset virherajat	50

OSA B MOLEKYYLIDYNAMIIKAN SIMULOINTI

1. JOHDANTO	1
2. KLASSILLINEN DYNAMIIKKA	2
2.1. Vuorovaikutuspotentiaalit	2
2.2. Liiketyhtälöt	6
2.3. Liiketyhtälöiden numeerinen integrointi	9
3. KÄYTÄNNÖN SIMULOINTIA	15
3.1. Periodiset reunaehdot, minimikuvasääntö ja lähinaapurilistat	15
3.2. Potentiaalien ja voimien laskeminen	17
3.3. Pitkän kantaman voimat	19
4. TULOSTEN ANALYSOINTI I: STAATTISIA OMINAISUUKSIA	21
4.1. Tavallisimmat statistiset ensemblit	22
4.2. Yksinkertaiset termodynaamiset ominaisuudet	24
4.3. Termodynaamiset vastefunktiot	26
4.4. Entropia ja vapaa energia	27
4.5. Staattisia rakenneparametrejä	28
5. TULOSTEN ANALYSOINTI II: DYNAAMISIA OMINAISUUKSIA	34
5.1. Aikakorrelaatiofunktiot	34
5.2. Diffuusio	36
5.3. Statistisen virheen arviointia	38

OSA C SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ

1. DIFFERENTIAALIYHTÄLÖN DISKRETISOIMINEN	2
1.1. Derivaattojen erotusosamäärät	2
1.2. Alkuarvot ja reunaehdot	4
1.3. Poissonin yhtälö	5
2. YKSIDIMENSIOISIA S-YHTÄLÖITÄ	6
2.1. Vapaa hiukkanen (free particle)	6
2.2. Hiukkanen laatikossa (particle in a box)	7
2.3. Harmoninen oskillaattori	7
2.4. Pallosymmetrinen potentiaali ja vety-atomi	8
2.5. Monielektroniset atomit	11
3. KANTAFUNKTIOMENETELMÄT	13
3.1. Schrödingerin yhtälön matriisimuoto ja variaatioperiaate	13
3.2. Konfiguraatiovuorovaikutus- ja multikonfiguraatiomenetelmä	15
3.3. Semiempiiriset menetelmät	16
4. <i>AB INITIO</i> -MOLEKYYLIDYNAMIIKKA	17
4.1. Johdanto	17
4.2. Car–Parrinello -menetelmä	18
5. AJASTA RIIPPUVAN SCRÖDINGERIN YHTÄLÖN NUMEERINEN RATKAISEMINEN	23
6. KVANTTISIMULOINTI	27
6.1. Diffuusio Monte Carlo menetelmä (DMC)	28
6.2. Polkuintegraali Monte Carlo menetelmä (PIMC)	30
6.3. Aaltopakettien dynamiikka (WPD)	35

OSA D MUITA MENETELMIÄ

1. SOLUAUTOMAATTISIMULOINTI	1
1.1. Johdanto	1
1.2. Yksiulotteiset soluautomaatit	3
1.3. Kaksiulotteiset soluautomaatit	4
1.4. Soluautomaattien sovellutuksia	6
2. JOHDATUS NEURAALIVERKKOIHIN	9
2.1. Rakenne	9
2.2. Toiminta	10
2.3. Opetus	12
2.4. Käyttömahdollisuudet	14
2.5. Toteutukset	15
2.6. Sovellukset	16
3. GENEETTISET ALGORITMIT	17
3.1. Peruskäsitteet	17
3.2. Geneettisten algoritmien rakenne	19
3.3. Kromosomien koodaaminen	21
3.2. Geneettisten algoritmien sovellutuksia	22
4. SUMEA LOGIIKKA JA JÄRJESTELMÄT	23
4.1. Epätäsmällisyys ja epävarmuus	23
4.2. Sumeat joukot	24
4.3. Sumea päättely	28
5. KVANTTITIEKONEET	29
5.1. Johdanto	29
5.2. Kvanttibitti ja loogiset perusoperaatiot	29
5.3. Alkutekijöiden etsintä	31
5.4. Dekoherenssi	34
5.5. Käytännön toteutuksista	34

Kirjallisuutta

OSA A

- V. Karimäki, *Stokastinen simulointi* (Laskennallisen fysiikan kesäkoulu 8.–12.6.1992, Konnevesi).
- P.K. MacKeown ja D.J. Newman, *Computational Techniques in Physics* (1987, Adam Hilger, Bristol).
- D.W. Heerman, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (1986, Springer-Verlag, Berlin).
- K. Binder ja D.W. Heerman, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (1988, Springer-Verlag, Berlin).
- N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller ja E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt ja M.P. Vecchi, *Science* **220**, 671 (1983).
- M.P. Allen ja D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (1990, Clarendon Press, Oxford).
- J.S. Milton ja J.C. Arnold, *Introduction to probability and statistics* (1990, McGraw-Hill, New York).

OSA B

- J.M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods* (1992, John Wiley & Sons, Inc., New York).
- M.P. Allen ja D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (1990, Clarendon Press, Oxford).
- R.M. Nieminen, Luentomuistiinpanoja edellisen pohjalta (199?)
- Juhani von Boehm, *Molekyylidynamiikkamenetelmä* (2000, Otatiето).

OSA C

- P.K. MacKeown ja D.J. Newman, *Computational Techniques in Physics* (1987, Adam Hilger, Bristol).
- S. Brandt ja H.D. Dahmen, *Quantum Mechanics on the Personal Computer* (1990, Springer-Verlag, Berlin).
- T.T. Rantala, *Local-Density Electronic Structure Calculations on the Spectra and Reactivity of Metals*, Acta Universitatis Ouluensis, A148 (1987).

P.W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics* (1990, Oxford University Press, Oxford).

A. Hinchliffe, *Computational Quantum Chemistry* (1988, John Wiley & Sons, New York).

W.J. Hehre, L. Radom, P. v.R. Schleyer ja J.A. Pople, *Ab initio Molecular Orbital Theory* (1986, John Wiley & Sons, Inc., New York).

R. Car ja M. Parrinello, *Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory*, *Phys.Rev.Lett.* **55**, 2471 (1985).

P.B. Visscher, *A fast explicit algorithm for the time-dependent Schrödinger equation*, *Computers in Physics*, NOV/DEC 1991, 596.

F.J. Vesely, *Computational Physics (Einführung in die Computative Physik)* (1993, WUV-Universitätsverlag, Wien).

J.-L. Calais, *Quantum Chemistry Workbook* (1994, John Wiley & Sons, New York).

OSA D

- J. Haataja, *Soluautomaattisimulointi*, CSC Research Reports R02/91 (1991).
- K. Melkas, J. Saarinen ja K. Kaski, *Lyhyt johdatus neuraaliverkkoihin*, Julkaisematon raportti.
- R.P. Lippmann, *An Introduction to Computing with Neural Nets*, *IEEE ASSP Magazine*, **4**, 4 (1987).
- Genetic Algorithms and Simulated Annealing*, edited by Lawrence Davis (Research Notes in Artificial Intelligence, Pitman Publishing 1987).
- John H. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, Ann Arbor: University of Michigan Press.
- E. Juuso, *Fuzzy-neuromenetelmät prosessiautomaatiossa* (1995, luentomoniste, Prosessitekniiikan osasto, Oulun yliopisto, Oulu).
- J.S. Milton ja J.C. Arnold, *Introduction to probability and statistics* (1990, McGraw-Hill, New York).
- Päivi Törmä ja Kalle-Antti Suominen, *Kvanttitietokoneet: teoria ja käytäntö*, *Arkhimedes* **4**, 271–288 (1995).