

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования_
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол № 4 от 26.04.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Математическое моделирование физических процессов

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

28.04.01 - Нанотехнологии и микросистемная техника

Направленность образовательной программы

Квантовые и нейроморфные технологии

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2025 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.ДВ.01.02 Математическое моделирование физических процессов относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-3: Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий	<p>ПК-3.1: Имеет представление о физических и математических моделях, а также методах компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p> <p>ПК-3.2: Может применять физические и математические модели, а также методы компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p> <p>ПК-3.3: Разрабатывает физические и математические модели, а также методы компьютерного моделирования исследуемых физических процессов в области нанотехнологии, нанoeлектроники и квантовых технологий</p>	<p>ПК-3.1: Знать метод молекулярной динамики для моделирования системы взаимодействующих частиц.</p> <p>Уметь разрабатывать модели несложных физических процессов, включая этапы постановки задачи.</p> <p>Владеть навыками разработки компьютерных программ.</p> <p>ПК-3.2: Знать методы Монте-Карло для моделирования атомных систем.</p> <p>Уметь разрабатывать модели несложных физических процессов, включая этапы составления программы.</p> <p>Владеть навыками визуализации результатов научных экспериментов.</p> <p>ПК-3.3: Знать основные модели для изучения газов, жидкостей, аморфных и кристаллических твердых тел, магнетиков, полупроводниковых соединений и сплавов.</p>	Практическое задание	Экзамен: Контрольные вопросы

		<p>Уметь разрабатывать модели несложных физических процессов, включая этапы тестирования и анализа результатов моделирования.</p> <p>Владеть навыками обработки результатов научных экспериментов.</p>		
--	--	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	4
Часов по учебному плану	144
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	49
Промежуточная аттестация	45
	Экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
Тема 1 Введение	3	1	0	1	2
Тема 2. Метод молекулярной динамики. Сдача отчета по первой задаче	46	7	16	23	23
Тема 3. Методы Монте-Карло. Сдача отчета по второй задаче	48	8	16	24	24
Аттестация	45				
КСР	2			2	

Итого	144	16	32	50	49
-------	-----	----	----	----	----

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Введение.

Цели и задачи курса. Основная и дополнительная литература. Краткая история физического моделирования. Компьютерный эксперимент – третье направление в физике, промежуточное между экспериментальными и теоретическими исследованиями. Достоинства и недостатки компьютерного эксперимента.

2. Метод молекулярной динамики

2.1. Общая характеристика метода молекулярной динамики.

Энергия взаимодействия системы из N частиц. Уравнения движения частиц на основе классической механики Ньютона. Начальные условия. Особенности численного решения уравнений движения. Алгоритм Верле. Проблема выбора шага по времени. Различные граничные условия: периодические, случайные, свободные, жесткие.

2.2. Потенциалы межатомного взаимодействия (ПМВ).

Понятие эмпирического ПМВ. Двухчастичные и трехчастичные ПМВ. Потенциал твердых шаров. Потенциал Борна-Майера. Потенциал Морзе. Потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Вуксевича. Трехчастичный потенциал Стиллинджера-Вебера для ковалентных полупроводников. Потенциал Терсоффа.

2.3. Применение метода молекулярной динамики к исследованию газов и жидкостей.

Усреднение по пространству и усреднение по времени. Эргодичность. Определение характеристик микроканонического ансамбля частиц. Переход к равновесию и процедура получения средних значений. Определение температуры. Определение давления. Получение распределения Максвелла для идеального газа. Получение уравнения состояния неидеального газа. Определение коэффициента самодиффузии. Молекулярная динамика канонического ансамбля. Перенормировка скоростей. Канонический ансамбль при постоянном давлении.

2.4. Метод молекулярной динамики для твердых тел.

Основные задачи моделирования. Особенности моделирования кристаллов с кубическими решетками. Особенности граничных условий в кристаллах. Моделирование образования вакансии в алмазной решетке. Расчет ее конфигурационных и энергетических характеристик. Моделирование других дефектов: вакансионных комплексов, собственных и примесных междоузельных атомов. Моделирование аморфного состояния. Функция радиального распределения.

3. Методы Монте-Карло.

3.1. Общая характеристика методов Монте-Карло (ММК)

Сравнение детерминистических и стохастических методов. Марковский процесс. Стационарность. Эргодичность. Оценка погрешности ММК.

3.2. Генераторы случайных чисел (ГСЧ).

Линейный конгруэнтный генератор. Тестирование ГСЧ на период, на коррелированность, на равномерность, на короткие корреляции. Построение улучшенного ГСЧ.

3.3. Применение ММК к исследованию случайных блужданий.

Одномерные случайные блуждания. Двумерные и трехмерные случайные блуждания. Диффузия частиц в модели решеточного газа. Другие виды случайных блужданий и их применение для исследования физических систем (рассеяние частиц на неподвижных центрах, движение экситонов и т.д.).

3.4. ММК для моделирования системы частиц

Получение средних значений наблюдаемых величин. Идея предпочтительной выборки. Алгоритм Метрополиса. Микроканонический ансамбль частиц. Демон. Канонический ансамбль. Модель Изинга для магнетиков. Определение критической температуры, теплоемкости, намагниченности. Критическое замедление. Модель Изинга для бинарного сплава. Получение фазовых диаграмм.

3.5. Моделирование роста кристаллических пленок.

Классическая модель зародышеобразования. Кристаллизация на реальной поверхности. Роль дефектов. Модель Косселя-Странского. Алгоритм моделирования. Совершенствование модели (диффузия атомов по поверхности, рост за счет движения ступеней и т.д.).

3.6. Моделирование ионной имплантации.

Основные положения теории Линдхарда-Шарффа-Шиотта. Модель твердых шаров. Получение гистограммы распределения внедренных шаров. Расчет среднепроецированного пробега. Сравнение с экспериментальными значениями.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Компьютерный эксперимент в физике : практикум / А. С. Васин ; ННГУ им. Н. И.

Лобачевского. - 3-е изд., испр. и доп. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2024. - 68 с. - Текст : электронный.

<http://e-lib.unn.ru/MegaPro/Download/MObject/10857>

1. Получение индивидуальных практических заданий, вопросов для сдачи допусков.
2. Подготовка к индивидуальным собеседованиям с преподавателем по полученным вопросам.
3. Контроль – сдача допуска.
4. Разработка алгоритма и составление программы на алгоритмическом языке высокого уровня. Контроль – демонстрация работы программы в компьютерном классе.
5. Тестирование программы, выполнение пунктов заданий.
6. Контроль – сдача задачи в электронном виде.
7. Написание отчета по задаче.
8. Контроль – сданный отчет в распечатанном на бумаге виде.
9. Пункты 1-5 выполняются поочередно, сначала для задачи по разделу «Метод молекулярной динамики», затем по разделу «Методы Монте-Карло».

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Практическое задание) для оценки сформированности компетенции ПК-3:

В ходе изучения курса обучающийся обязан выполнить 2 практических задания – по одной на два больших раздела курса. Каждый обучающийся получает свою задачу. Задания выбираются преподавателем. Практическое задание представляет собой задачу, требующую численного решения. Требуется разработать модель, провести физическую и математическую постановку задачи, написать программу в одной из систем программирования, выполнить тестирование

задачи, написать и сдать отчет по проделанной работе. Бесплатное ПО, доступное обучающемуся, перечислено в соответствующем разделе рабочей программы дисциплины.

Перечень задач для решения:

1. Моделирование аргоноподобного двумерного газа частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса.
2. Исследование температурной зависимости внутренней энергии двумерной системы частиц в каноническом ансамбле.
3. Получение уравнения состояния идеального двумерного газа.
4. Проверка генератора случайных чисел.
5. Одномерные случайные блуждания.
6. Двумерный ядерный реактор.
7. Моделирование роста грани простого кубического кристалла

Подробное описание задач приведено в методических материалах: Компьютерный эксперимент в физике : практикум / А. С. Васин ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - 3-е изд., испр. и доп. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2024. - 68 с. - Текст : электронный.

Прежде чем сдавать программу и отчет по задаче, обучающийся сдает преподавателю допуск к задаче. Допуск представляет собой изложение основных теоретических положений по тематике задачи.

Типовые вопросы для сдачи допуска:

1. Какие физические процессы изучаются в Вашей задаче?
2. Какие начальные и граничные условия используются в Вашей задаче?
3. Как выбирается шаг по времени при интегрировании уравнений движения?
4. Как генерируются случайные числа в задачах по методам Монте-Карло?
5. Нарисовать примерный интерфейс программы.
6. В каком виде Вы будете представлять графический и иллюстративный материал по результатам расчетов?

По итогам решения численной задачи студент обязан написать отчет. Отчет должен демонстрировать результат численного решения задачи, а также тест программы для заданных преподавателем вводных данных. Отчет должен включать следующие обязательные элементы: содержание, цель работы, теоретическую часть, описание методики, практическую часть, включающую описание и обсуждение результатов, заключение и/или выводы, список использованных источников. Отчет не должен содержать неправомерных заимствований.

Объем отчета – 15-30 стр. формата А4 (шрифт Times New Roman 12 пт, межстрочный интервал – полуторный, интервал между абзацами – отсутствует, поля – верхнее 2 см, нижнее 2 см, левое 3 см, правое 1,5 см).

Критерии оценивания (оценочное средство - Практическое задание)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Сдан допуск к задаче. Составлена программа. Продемонстрирована ее работа. Проведено тестирование программы. Составлен и сдан отчет.
не зачтено	Пока не выполнены все пункты из «Зачтено».

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено			зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели	Имеется минимальный набор навыков для решения	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартны	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартны	Продемонстрированы навыки при решении нестандарт	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартны

	вследствие отказа обучающегося от ответа	место грубые ошибки	стандартны х задач с некоторым и недочетами	х задач с некоторым и недочетами	х задач без ошибок и недочетов	ных задач без ошибок и недочетов	х задач
--	--	---------------------	---	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	---------

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-3

1. Алгоритм Верле решения задачи Коши в ММД.
2. Получение уравнения состояния неидеального газа и определение коэффициента самодиффузии в системе частиц ММД.
3. Генераторы случайных чисел. Линейный конгруэнтный генератор.
4. Алгоритм Метрополиса в ММК.
5. Модель роста кристалла Коссея.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Ответ полный. На дополнительные вопросы отвечает, в том числе и за пределами программы курса. Хорошая эрудиция, физическая грамотность.
отлично	Ответ полный. Грамотно отвечает на большинство дополнительных вопросов. Свободно владеет материалом.
очень хорошо	Ответ полный. Отвечает на большинство дополнительных вопросов.
хорошо	Ответ с незначительными ошибками. Отвечает без наводящих вопросов.
удовлетворительно	Не отвечает на половину вопросов билета. Отвечает только с наводящими вопросами.
неудовлетворительно	Не отвечает на вопросы билета. Слабо ориентируется в терминологии.
плохо	Не отвечает ничего.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Михайлов Геннадий Алексеевич. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло : учебное пособие для вузов / Г. А. Михайлов, А. В. Войтишек. - Москва : Юрайт, 2024. - 323 с. - (Высшее образование). - URL: <https://urait.ru/bcode/540819> (дата обращения: 15.08.2024). - ISBN 978-5-534-11518-5 : 1399.00. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=908008&idb=0>.
2. Коткин Глеб Леонидович. Компьютерное моделирование физических процессов с использованием Matlab : учебное пособие для вузов / Г. Л. Коткин, Л. К. Попов, В. С. Черкасский. - 2-е изд. - Москва : Юрайт, 2024. - 202 с. - (Высшее образование). - URL: <https://urait.ru/bcode/541375> (дата обращения: 15.08.2024). - ISBN 978-5-534-10512-4 : 759.00. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=904248&idb=0>.
3. Молекулярно-динамическое моделирование в пакете LAMMPS : учебно-методическое пособие. - Воронеж : ВГУ, 2018. - 43 с. - Рекомендовано для студентов 1-го курса физического факультета очной формы обучения по программе магистратуры. Для направления 11.04.04 Электроника и наноэлектроника (профиль «Интегральная электроника и наноэлектроника»). - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ВГУ - Инженерно-технические науки., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=754618&idb=0>.
4. Медведев Николай Николаевич. Молекулярная динамика. Получение моделей : учебное пособие для вузов / Н. Н. Медведев. - Москва : Юрайт, 2024. - 168 с. - (Высшее образование). - URL: <https://urait.ru/bcode/551754> (дата обращения: 15.08.2024). - ISBN 978-5-534-18821-9 : 819.00. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?>

Action=FindDocs&ids=907211&idb=0.

Дополнительная литература:

1. Кручинин Н. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование макромолекул : учебное пособие для обучающихся по образовательным программам_x000d_ высшего образования по направлениям подготовки 03.03.03 радиофизика и 03.04.02 физика / Кручинин Н. Ю. - Оренбург : ОГУ, 2018. - 103 с. - Рекомендовано ученым советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Оренбургский государственный университет» для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки 03.03.03 Радиофизика и 03.04.02 Физика. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ОГУ - Физика. - ISBN 978-5-7410-2143-9., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=747580&idb=0>.
2. Васин Александр Сергеевич. Компьютерный эксперимент в физике : практикум / А. С. Васин ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - 3-е изд., испр. и доп. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2024. - 68 с. - Текст : электронный., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=892171&idb=0>.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

- 1) Microsoft Visual Studio Community Edition с надстройкой Python;
- 2) ОС Windows и пакет Office;
- 3) интернет-ресурсы Фундаментальной библиотеки ННГУ <http://www.lib.unn.ru/>;
- 4) интернет-ресурс справочной и математической литературы со свободным доступом <http://www.eqworld.ipmnet.ru>.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, компьютерами.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки/специальности 28.04.01 - Нанотехнологии и микросистемная техника.

Автор(ы): Васин Александр Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент.

Рецензент(ы): Конаков Антон Алексеевич, кандидат физико-математических наук.

Заведующий кафедрой: Морозов Олег Александрович, доктор физико-математических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 15.04.2024, протокол № б/н.