

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 № 12 от 09.11.2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Математическое моделирование физических процессов

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Направление подготовки / специальность

09.03.02 - Информационные системы и технологии

Направленность образовательной программы

Информационные технологии в системах космической связи

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2022 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.1.ДВ.03.02 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-14: Способен обосновывать правильность выбранной модели, сопоставляя результаты экспериментальных данных и полученных решений в области применения информационных технологий в физических исследованиях и смежных областях.	ПК-14.1: Знать основные методы обработки и сравнения результатов экспериментальных данных и полученных решений ПК-14.2: Уметь обосновывать правильность выбранной модели ПК-14.3: Владеть опытом выбора и обоснования правильности выбранной модели, сопоставления результатов экспериментальных данных и полученных решений	ПК-14.1: Знать основные свойства физических моделей, терминологию, взаимосвязь модели и физических законов, с помощью которых она описывается. ПК-14.2: Уметь применять методы моделирования, тестирования результатов. ПК-14.3: Владеть методами молекулярной динамики и методами Монте-Карло для реализации разрабатываемых моделей.	Задачи	Экзамен: Контрольные вопросы
ПК-16: Способен к выполнению работ по проектированию, отладке, проверке работоспособности и модификации программного обеспечения информационных систем	ПК-16.1: Знать методы разработки программного обеспечения и технологии программирования ПК-16.2: Владеть навыками проектирования, отладки программного обеспечения и проверки работоспособности	ПК-16.1: Знать основные методы вычислительной математики, применяемые при разработке программного обеспечения и в технологии программирования ПК-16.2: Владеть методологией научного исследования, иметь навыки экспериментального, теоретического и модельного изучения различных явлений и процессов.	Задачи	Экзамен: Контрольные вопросы

--	--	--	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	5
Часов по учебному плану	180
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	32
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	78
Промежуточная аттестация	36 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	
	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0
Тема 1 Введение	3	1	0	1	2
Тема 2. Метод молекулярной динамики. Сдача отчета по первой задаче	69	15	16	31	38
Тема 3. Методы Монте-Карло. Сдача отчета по второй задаче	70	16	16	32	38
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	180	32	32	66	78

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.

Порядок выполнения и контроля самостоятельной работы

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».

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Практические задания для студентов и методические рекомендации по их выполнению изложены в методическом пособии: . Васин А.С. Компьютерный эксперимент в физике: Практикум. – 2-е изд. исправл. и доп. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2022. – 60 с.

Некоторые типовые вопросы для сдачи допуска.

1. Сформулировать цель работы.
2. Какие физические процессы изучаются в Вашей задаче?
3. Написать и объяснить формулы потенциалов межатомного взаимодействия, применяемые в Вашей задаче.
4. Написать и объяснить дифференциальные уравнения движения частиц.
5. Объяснить алгоритм решения системы полученных дифференциальных уравнений.
6. Какие начальные и граничные условия используются в Вашей задаче?
7. Как проверить выполнение законов сохранения энергии, импульса?
8. Как выбирается шаг по времени при интегрировании уравнений движения?
9. Как генерируются случайные числа в задачах по методам Монте-Карло?
10. Объяснить алгоритм Метрополиса для Вашей задачи.
11. Привести примеры тестирования правильности работы программы.
12. Привести структурную схему программы моделирования изучаемого процесса (явления).
13. Нарисовать примерный интерфейс программы.
14. В каком виде Вы будете представлять графический и иллюстративный материал по результатам расчетов?

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 - Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-14:

	Темы	Компетенции
1	Моделирование аргоноподобного двумерного газа частиц с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-14.3
	Моделирование испарения двумерной капли жидкости.	ПК-14.1, ПК-14.2
3	Исследование распределения по скоростям молекул двумерного идеального газа.	ПК-14.1, ПК-14.2, ПК-14.3

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Задачи) для оценки сформированности компетенции ПК-16:

1	Исследование двумерного распределения частиц при диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий	ПК-16.1, ПК-16.2
2	Модель Изинга на квадратной решетке для ферромагнетика с переворотом спина в каноническом ансамбле.	ПК-16.1, ПК-16.2

Критерии оценивания (оценочное средство - Задачи)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Сдан допуск по 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	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы 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 вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных 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-14

№	Вопросы	
1	Компьютерный эксперимент в физике. Его достоинства и недостатки.	ПК-14.
2	Общая характеристика метода молекулярной динамики. Выбор потенциала взаимодействия и формы расчетной ячейки.	ПК-14.

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-16

1	Применение ММК к исследованию случайных блужданий.	ПК-16.
2	Случайные блуждания частицы решеточного газа: связь с диффузией.	ПК-16.
3	ММК для моделирования системы частиц. Идея предпочтительной выборки.	ПК-16.

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.

Оценка	Критерии оценивания
	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. 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>.
2. Сивухин Дмитрий Васильевич. Общий курс физики : [для физ. специальностей вузов]. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. - М. : Наука, 1975. - 551 с. : ил. - 1.42., 105 экз.
3. Павлов Павел Васильевич. Физика твердого тела : учебник. - 3-е изд., стер. - М. : Высшая школа, 2000. - 494 с. - 78.54., 33 экз.
4. Васин Александр Сергеевич. Моделирование роста грани простого кубического кристалла : практикум для студентов магистратуры, обучающихся по направлениям подготовки 011200 "Физика", 210100 "Электротехника и нанoeлектроника", 230200 "Информационные системы" / А. С. Васин ; Нижегород. гос. ун-т им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Нижегород. гос. ун-т, 2014. - 18 с., 13 экз.
5. Васин А. С. Применение численных методов к моделированию физических процессов: Практикум / Васин А. С. - 2-е изд., испр. и доп. - Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2021. - 44 с. - Рекомендовано методической комиссией физического факультета для студентов физического факультета ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 09.03.02 «Информационные системы и технологии». - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ННГУ им. Н. И. Лобачевского - Физика., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=783197&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Гулд Харви. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 1 / пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М. : Мир , 1990. - 349 с. : ил. - ISBN 5-03-001593-0 : 2.20., 2 экз.
2. Гулд Харви. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 2 / пер. с англ. А. Н. Полюдова,

В. А. Панченко. - М. : Мир , 1990. - 399 с. : ил. - ISBN 5-03-001594-9 : 2.50., 2 экз.

3. Жаблон К. Применение ЭВМ для численного моделирования в физике / пер. с фр. А. В. Арсентьевой ; под ред. В. В. Александрова, Ю. В. Вишнякова. - М. : Наука, 1983. - 235 с. : ил. - (Библиотека программиста). - 0.90., 1 экз.

4. Кунин Стивен Е. Вычислительная физика / пер. с англ. А. Д. Баркалова, А. Н. Явохина ; под ред. А. Н. Матвеева. - М. : Мир, 1992. - 518 с. - 122.00., 2 экз.

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

1. Пакет Microsoft Visual C++ , установленный в компьютерном классе.

2. Пакет компьютерных аналитических и графических вычислений для персонального компьютера. Допускается применение сред Wolfram Mathematica, Matlab, MathCAD, Maple или любых иных компьютерных ресурсов аналогичного назначения.

3. 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, специализированным оборудованием: Терминал-класс с 12 компьютерами с лицензионным программным обеспечением. Лекционная аудитория с компьютером, проектором, экраном

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 ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 09.03.02 - Информационные системы и технологии.

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

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

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 20.01.2022, протокол № б/н.