

ГОУ ВПО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ

Составлен в соответствии с государственными требованиями к минимуму содержания и уровню подготовки выпускников по направлению 11.04.04 – Электроника и наноэлектроника и Положением «Об УМКД РАУ».

УТВЕРЖДАЮ:



Инженерно-физический институт

Кафедра технологии материалов и структур электронной техники

Автор: д.ф.-м.н., и.о. профессор Мамасакхисов Евгений Шамильевич

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

Дисциплина: Б1.0.20 «Методы моделирования в физике»

Направление: 11.03.04 «Электроника и аноэлектроника»

1. Аннотация

В рамках дисциплины «Методы моделирования в физике» изучаются современные методы компьютерного моделирования физических систем и анализа их поведения, а также даются представления о различных характеристиках, описывающих свойства различных молекулярных систем.

Цель преподавания дисциплин:

Целью изучения дисциплины является подготовка высококвалифицированных специалистов, владеющих теоретическими знаниями и практическими навыками в области компьютерного моделирования физики молекулярных систем, находящихся в твердом, жидком и газообразном состояниях, и способных на основе полученных знаний к активной творческой работе в области технической физики и нанотехнологий как в научно-исследовательских учреждениях, так и в условиях промышленного производства.

Учебная задача: Задачи курса состоят в изложении основных понятий, необходимых для описания и последующего компьютерного моделирования физических процессов, протекающих в молекулярных системах, включая молекулярные кристаллы, аморфные тела, полимеры, углеродные нанотрубки, и т. д.

Основные методы проведения занятий, лекции, проработки.

Список литературы: содержит 4 наименования книг и монографий отечественных и зарубежных авторов, 3 научных статьи; этот список поможет студентам освоить и создать свой профессиональный исследовательский инструментарий, обеспечить целостность обучения.

Краткое содержание курса: Основы метода Монте Карло (МК). Динамические методы МК. Статические методы МК. Метод молекулярной динамики.

2. Требования к исходным уровням знаний и умений студентов

Квантовая механика, статистическая физика и термодинамика. Базовые навыки в программировании на языке Python.

3. Цель и задачи дисциплины

Основная цель изучаемой дисциплины — ознакомление студентов с основными подходами и методами моделирования различных процессов, происходящих в физических системах. Подготовка будущих специалистов в области микро и наноэлектроники с необходимым багажом

теоретических и прикладных знаний и дальнейшему изучению специальной литературы по отдельным вопросам данной отрасли.

4. Требования к уровню освоения содержания дисциплины

В результате изучения дисциплины студент должен:

- 1) знать новейшие достижения в области моделирования физических систем;
- 2) знать физические принципы и явления, используемые для совершенствования известных и создания новых физико-технических объектов и технологий;
- 3) уметь взаимодействовать со специалистами в других предметных областях, осуществлять поиск научно-технической и образовательной информации;
- 4) владеть интерпретацией результатов научного исследования, методологией научных исследований;
- 5) уметь применять физические принципы и явления для решения прикладных задач;
- 6) владеть методами интерпретации результатов, полученных в результате применения методов компьютерного моделирования физических явлений.

5. Трудоемкости дисциплины и видов учебной работы по учебному плану

Виды учебной работы	Всего (ак. час)
<i>Общая трудоемкость изучения дисциплины, в т.ч.:</i>	216
1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	86
1.1. Лекционные занятия	52
1.2. Семинарские занятия	-
1.3. Практические занятия	-
1.4. Лабораторные работы	34
2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	98
2.1. Контактная самостоятельная работа	-
2.2. Бесконтактная самостоятельная работа	98
<i>Итоговый контроль</i>	<i>Экзамен 32</i>

6. Распределение весов по формам контроля

Веса и формы контролей	Вес форм текущих контролей в результирующей оценке текущего контроля	Вес форм промежуточных контролей и результирующей оценки текущего контроля в итоговой оценке промежуточного контроля	Вес итоговых оценок промежуточных контролей в результирующей оценке промежуточного контроля	Вес результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля			
				M1	M2	M3	
Вид учебной работы/ контроля	M1	M2	M3	M1	M2	M3	
Контрольная работа	0	0	1	0	0	1	
Тест							
Курсовая работа							
Лабораторные работы							
Письменные домашние задания							
Эссе							
Семинар							
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках соответствующих промежуточных контролей		0	0	0			
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		0					

Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		0						
Вес итоговой оценки 3-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		1						
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля		0.4						
Вес оценки экзамена/зачета в результирующей оценке итогового контроля		0.6						
	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$

7. Содержание дисциплины

7.1 Тематический план и трудоемкости аудиторных занятий

Разделы и темы дисциплины	Всего (ак. часов)	Лекционные занятия (ак. часов)	Семинарские занятия (ак. часов)	Лабораторные работы (ак. часов)	Практические занятия (ак. часов)
1	2	3	4	5	6
МОДУЛЬ 1. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ФИЗИКЕ	86	52	-	34	-

Введение	1	1		-	-
<u>Раздел 1. Случайные блуждания</u>	9	6		3	-
<i>Тема 1.1. Типы случайных процессов</i>	4	2		2	-
<i>Тема 1.2. Процесс Бернулли</i>	3	2		1	-
<i>Тема 1.3. Случайные блуждания</i>	2	2			
<u>Раздел 2. Вероятность и случайные процессы</u>	10	8		2	-
<i>Тема 2.1. Вероятность и теорема Байеса</i>	4	3		1	-
<i>Тема 2.2. Функция распределения и ее свойства</i>	3	2		1	-
<i>Тема 2.3. Марковские процессы</i>	3	3			
<u>Раздел 3. Метод Монте — Карло</u>	40	22		18	-
<i>Тема 3.1. Теоретические основы метода Монте — Карло (МК)</i>	8	6		4	-
<i>Тема 3.2. Динамические методы МК</i>	10	4		6	-
<i>Тема 3.3. Статические методы МК</i>	8	6		4	
<i>Тема 3.4. Методы МК для оценки ландшафта свободной энергии</i>	8	6		4	
<u>Раздел 4. Метод молекулярной динамики</u>	26	15		11	-
<i>Тема 4.1. Теоретические основы метода молекулярной динамики (МД)</i>	8	5		3	-
<i>Тема 4.2. Алгоритм Верле</i>	9	5		4	-
<i>Тема 4.3. Учет взаимодействий дальнего порядка</i>	9	5		4	
ИТОГО	86	52		34	-

7.2 Содержание разделов и тем дисциплины

МОДУЛЬ 1.

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ФИЗИКЕ

Введение

Общие сведения о методах моделирования в физике. Их значение для фундаментальной и прикладной науки. Области применений.

Раздел 1. Случайные блуждания

Тема 1.1. Типы случайных процессов

Введение понятия случайного процесса для решения физических задач. Основные типы случайных процессов.

Тема 1.2. Процесс Бернулли

Основные свойства процессов Бернулли. Их возможное применение.

Тема 1.3. Случайные блуждания

Определение случайного блуждания на решетке и графе. Основные свойства случайного блуждания на решетке при наличии, или отсутствии памяти. Возможное использование алгоритмов случайного блуждания при моделировании физических систем.

Раздел 2. Вероятность и случайные процессы

Тема 2.1. Вероятность и теорема Байеса

Определение вероятности. Условная вероятность. Независимость событий. Случайные процессы. Понятие стационарного процесса. Формула полной вероятности. Априорная и апостериорная вероятности. Формула Байеса и ее применения.

Тема 2.2. Функция распределения и ее свойства

Понятие случайной величины. Закон распределения дискретной случайной величины. Функция распределения случайной величины и ее свойства. Непрерывная случайная величина. Плотность распределения.

Тема 2.3. Марковские процессы

Определение Марковского процесса (МП). Уравнение Колмогорова — Чепмена.

Основное кинетическое уравнение и принцип детального баланса. МП с непрерывным и дискретным временем.

Раздел 3. Метод Монте — Карло

Тема 3.1. Теоретические основы метода Монте — Карло (МК)

Сравнение простой выборки и выборки по важности. Простая выборка. Случайные бл и самоизбегающие случайные блуждания. Расчет средних значений методом простой выборки. Его преимущества и ограничения. Выборка по значимости. Модели и алгоритмы. Организация программ МК и интерпретация динамической выборки МК. Динамическая интерпретация выборки по значимости. Статистическая ошибка. Эффекты конечного размера.

Тема 3.2. Динамические методы МК

МК цепь Маркова. Марковский процесс в дискретном времени и принцип детального баланса. Эргодические цепи Маркова. Алгоритм Метрополиса.

Тема 3.3. Статические методы МК

Статические методы МК и случайные блуждания. Алгоритмы Розенблата.

Тема 3.4. Методы МК для оценки ландшафта свободной энергии

Зонтичная выборка. Мультиканоническая выборка. Метод Вонга — Ландау.

Раздел 4. Метод молекулярной динамики

Тема 4.1. Теоретические основы метода молекулярной динамики (МД)

Интегрирование уравнений движения. Потенциалы взаимодействия и расчет силы. Начальное состояние. Мера производительности. Симуляция в различных ансамблях и термостаты.

Тема 4.2. Алгоритм Верле

Разновидности алгоритма Верле.

Тема 4.3. Учет взаимодействий дальнего порядка

Метод сумм Эвальда. Точечные заряды. Дипольные частицы. Диэлектрическая проницаемость. Граничные условия. Точность расчета и вычислительная сложность.

7.3 Вопросы

1. Моделирование молекулярной динамики, идейные основы и возможности компьютерной реализации.
2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий.
3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация (алгоритмы: Верле, leap-frog Верле, скоростной Верле).
4. Моделирование динамики конденсированных систем. Периодические граничные условия.
5. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий. Оценка быстродействия.
6. Алгоритм сканирования для нахождения ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Оценка быстродействия.
7. Температура. Термостатирование молекулярной системы (масштабирование скоростей; термостат Берендсена; термостат Нозе-Гувера; стохастическая динамика; столкновительный термостат).
8. Учет растворителя. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика.
9. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена.
10. Моделирование макромолекулы в гидродинамическом потоке. 1
1. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента.
12. Обработка траекторий молекулярной динамики. Временные автокорреляционные функции. Коэффициенты переноса.
13. Основные понятия теории вероятностей. Дискретная и непрерывная случайная величина. Функция распределения, плотность вероятности. Примеры случайных величин с различными распределениями.
14. Основные понятия статистической физики. Статсумма, плотность состояний, понятие ансамбля. Примеры.
15. Понятие метода Монте-Карло. Метод Монте-Карло для вычисления интегралов. Погрешность метода Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса.
16. Метод случайных блужданий. Броуновское движение и диффузия. Блуждание без самопересечений и приложения к физике полимеров.
17. Модели спиновой динамики. Модель Изинга. Моделирование термодинамических свойств ферромагнетика в двумерной модели Изинга.

18. Модель твердых сфер. Задание начальной конфигурации. Вычисление давления системы твердых сфер в зависимости от плотности в одномерном и двумерном случае.
19. Применение метода Монте-Карло для квантовых систем. Вариационный метод Монте-Карло для одномерного стационарного уравнения Шредингера.
20. Метод случайных блужданий для стационарного уравнения Шредингера. Диффузионный метод Монте-Карло. Алгоритм метода, приложения для модельных систем.

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Рекомендуемая литература

1. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. М. ; Ижевск : Ин-т компьютер. Исслед., 2012
2. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М., Наука 1995.

8.2. Программные средства освоения дисциплины

Python 3.*

8.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс, проектор

Учебная программа:

Одобрена кафедрой Общей физики и квантовых наноструктур

Зав. кафедрой: Айрапетян Д. Б.

(подпись)