

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Интегралы по траекториям с помощью молекулярной динамики
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: Н.Д. Кондратюк, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем 11.03.2025

Аннотация

В первой части курса рассматриваются теоретические аспекты интерпретации: основные понятия, вывод интегралов по траекториям через каноническую матрицу плотности и оператор эволюции времени. Работа над модельными задачами.

Вторая часть курса направлена на численную реализацию метода. Освоение необходимых программных пакетов, настройка их работы на суперкомпьютере. Знакомство с Path Integral Molecular Dynamics, Centroid Molecular Dynamics и Ring Polymer Molecular Dynamics. Расчет поправок на квантовость ядер для жидкой воды, жидкого водорода. Вычисление термодинамических и транспортных свойств рассматриваемых систем. Расчет спектров. Учет квантовости ядер в реакционной динамике. Получение энергетических барьеров химических реакций, включая биохимические процессы.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление студентов с методом интегралов по траекториям с помощью молекулярной динамики и его практической реализацией на многопроцессорных вычислительных системах.

Задачи дисциплины

- погружение в теоретическую часть метода интегралов по траекториям;
- приобретение обучающимися практических умений и навыков, необходимых для работы с многопроцессорными вычислительными системами;
- ознакомление обучающихся с прикладной частью метода интегралов по траекториям;
- формирование умений и навыков для применения полученных знаний для моделирования квантовых систем;
- привлечение студентов к работе над актуальными физическими задачами.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)

ограничения различных методов решения	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

Теоретические основы метода интегралов по траекториям, границы применимости метода.

уметь:

Моделировать простые системы с помощью метода интегралов по траекториям, проводить анализ полученных результатов.

владеть:

- навыками компиляции и запуска последовательных и параллельных программ с использованием систем очередей;
- навыками создания модели и её осуществления с помощью прикладного метода интегралов по траекториям; методами анализа полученных из модели результатов.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.
--	---

№	Тема (раздел) дисциплины	Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Формулировка квантовой теории через интегралы по траекториям.	5	4		10
2	Получение наблюдаемых величин через интегралы по траекториям.	5	4		5
3	Численная реализация метода на практике.	5	6		5
4	Использование программных пакетов для моделирования.	5	6		10
5	Моделирование конкретных физических систем.	5	6		5
6	Перспективы развития и новые приложения метода.	5	4		10
Итого часов		30	30		45
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 2 (Весенний)

1. Формулировка квантовой теории через интегралы по траекториям.

Введение. Формулировка Фейнмана. Основные понятия. Понятие интеграла по траектории. Вывод интегралов по траекториям через каноническую матрицу плотности и оператор эволюции времени. Переход к статсумме. Высокотемпературный предел, переход к классической механике.

2. Получение наблюдаемых величин через интегралы по траекториям.

Выражение для оператора наблюдаемой величины. Вывод среднего значения через интегралы по траекториям. Функциональные интегралы. Многочастичные интегралы по траекториям. Автокорреляционные функции. Метод получения динамических величин.

3. Численная реализация метода на практике.

История. Область применения. Понятие квантового полимера. Метод молекулярной динамики центроида. Решение уравнений движения в нормальных модах. Метод цепочечной молекулярной динамики. Различные реализации. Понятие цветного термостата. Использование термостатов в расчете. Получение наблюдаемых величин из расчета.

4. Использование программных пакетов для моделирования.

Ознакомление с реализацией метода интегралов по траекториям i-PI. Изучение программного языка i-PI, обзор возможностей программного пакета. Рассмотрение пакетов молекулярного моделирования, используемых для работы совместно с i-PI. Установка программного обеспечения, проведение тестовых расчетов.

5. Моделирование конкретных физических систем.

Расчет квантовых поправок для жидкой воды, жидкого водорода и жидкого гелия. Вычисление термодинамических и транспортных свойств рассматриваемых систем. Расчет спектров. Учет квантовости ядер в реакционной динамике. Получение энергетических барьеров химических реакций.

6. Перспективы развития и новые приложения метода.

Обзор решенных проблем. Направления развития вычислительных методов. Физические задачи, требующие использования данного подхода.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций и практических занятий: компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор), доступ к вычислительному кластеру.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012 год, том 24, номер 6, стр. 3-44
2. Tuckerman M. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford: Oxford University Press, 2010. 696 p.
3. Habershon, S., Manolopoulos, D. E., Markland, T. E., & Miller, T. F. (2013). Ring-polymer molecular dynamics: quantum effects in chemical dynamics from classical trajectories in an extended phase space. Annu. Rev. Phys. Chem., 64(December 2012), 387–413.
<https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-040412-110122>
4. Френкель Даан, Смит Беренд. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям —М. : Науч. мир., 2013. — 559 с.

Дополнительная литература

1. Ceriotti, M., Fang, W., Kusalik, P. G., McKenzie, R. H., Michaelides, A., Morales, M. A., & Markland, T. E. (2016). Nuclear Quantum Effects in Water and Aqueous Systems: Experiment, Theory, and Current Challenges. Chemical Reviews, 116(13), 7529–7550.
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00674>
2. Suleimanov, Y. V., Aoiz, F. J., & Guo, H. (2016). Chemical Reaction Rate Coefficients from Ring Polymer Molecular Dynamics: Theory and Practical Applications. The Journal of Physical Chemistry A, 120(43), 8488–8502. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.6b07140>

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

LAMMPS, i-PI, Python, Microsoft PowerPoint, Google Meet, Google Classroom

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

– посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;

- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	Н.Д. Кондратюк, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Интегралы по траекториям с помощью молекулярной динамики» обучающийся должен:

знать:

Теоретические основы метода интегралов по траекториям, границы применимости метода.

уметь:

Моделировать простые системы с помощью метода интегралов по траекториям, проводить анализ полученных результатов.

владеть:

- навыками компиляции и запуска последовательных и параллельных программ с использованием систем очередей;
- навыками создания модели и её осуществления с помощью прикладного метода интегралов по траекториям; методами анализа полученных из модели результатов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлого занятия.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. В чём состоит метод интегралов по траекториям?
2. Какая область применимости данного метода?
3. В чем разница между молекулярной динамикой центроида и цепочечной молекулярной динамикой?
4. Какие существуют программные пакеты для моделирования методом интегралов по траекториям с помощью молекулярной динамики?
5. Приведите примеры физических систем, в которых важно рассмотрение квантовости ядер.
6. Получите константу реакции $\text{CH}_4 + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{H}_2$ используя RPMD.
7. Реализуйте расчет свойств системы ионов CH_5^+ с учетом квантовости ядер водорода.
8. На примере автокорреляционной функции скорости продемонстрируйте связь между действительной и мнимой частями автокоррелятора.
9. Рассчитайте колебательный спектр гексагонального льда с учетом квантовых эффектов ядер. Проинтерпретируйте результат.
10. Рассчитайте колебательный спектр жидкой воды с учетом квантовых эффектов ядер. Проинтерпретируйте результат.

Примеры билетов:

Билет 1.

1. Формулировка Фейнмана. Основные понятия.
2. Выражение для оператора наблюдаемой величины. Вывод среднего значения через интегралы по траекториям.

Билет 2.

1. Вывод интегралов по траекториям через каноническую матрицу плотности и оператор эволюции времени.
2. Понятие цветного термостата. Использование термостатов в расчете.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен проводится в устной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.