

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики**

**В.В. Иванов**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Квантовое атомистическое моделирование
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

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

Аудиторных часов: 90 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 105 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 225, всего зач. ед.: 5

Программу составил: В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 29.05.2020

## Аннотация

Курс «Квантовое атомистическое моделирование» предусматривает ознакомление студентов с современными методами молекулярного моделирования в физике, химии, биологии и нанотехнологиях.

Задачи курса:

- формирование базовых знаний в области современных средств визуализации данных и молекулярной графике.
- приобретение навыков использования GRID-технологий.
- формирование способности анализировать полученные результаты, делать выводы об оптимальности применения тех или иных программных методов.

По результатам освоения курса студент должен:

знать принципы теоретико-вычислительного описания вещества на различных масштабных уровнях;

иметь базовые навыки применения программного обеспечения для численного решения задач на каждом из уровней;

знать принципы объединения различных масштабов для решения конкретных задач и иметь соответствующие навыки;

уметь оценивать вычислительную сложность поставленных задач и требуемых для их решения аппаратных ресурсов.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Введение
2. Потенциалы межатомного взаимодействия
3. Интегрирование уравнений движения
4. Равновесные системы
5. Неравновесные системы, релаксация
6. Параллельные вычисления
7. Основы вычислительной квантовой механики

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

- ознакомить студентов с современными методами молекулярного моделирования в физике, химии, биологии и нанотехнологиях.

### Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области современных средств визуализации данных и молекулярной графике;
- приобретение навыков использования GRID-технологий;
- формирование способности анализировать полученные результаты, делать выводы об оптимальности применения тех или иных программных методов.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности

<p>решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты</p>	<p>ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели</p>
	<p>ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты</p>

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

знать принципы теоретико-вычислительного описания вещества на различных масштабных уровнях;

иметь базовые навыки применения программного обеспечения для численного решения задач на каждом из уровней;

знать принципы объединения различных масштабов для решения конкретных задач и иметь соответствующие навыки;

уметь оценивать вычислительную сложность поставленных задач и требуемых для их решения аппаратных ресурсов.

уметь:

абстрагироваться от несущественного при решении прикладных задач;

пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач;

делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;

осваивать новые предметные области и вычислительные методики;

эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

навыками освоения большого объема информации;

навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;

культурой постановки и решения вычислительных задач.

### 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

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение		4	6	12
2	Потенциалы межатомного взаимодействия		2	10	15
3	Интегрирование уравнений движения		4	6	12
4	Равновесные системы		4	10	14
5	Неравновесные системы, релаксация		4	6	12
6	Параллельные вычисления		4	10	14
7	Основы вычислительной квантовой механики		4	6	12
8	Использование GRIG-технологий		4	6	14
Итого часов			30	60	105
Подготовка к экзамену		30 час.			

Общая трудоёмкость	225 час., 5 зач.ед.
--------------------	---------------------

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

Семестр: 2 (Весенний)

##### 1. Введение

Молекулярное моделирование - современный метод исследований в физике, химии, биологии и нанотехнологиях. Базовые понятия: системы координат, уравнения движения, периодические граничные условия, поверхности потенциальной энергии, единицы измерения.

##### 2. Потенциалы межатомного взаимодействия

Парные потенциалы: твердые, мягкие сферы, потенциалы Леннарда-Джонса и Букингема.

##### 3. Интегрирование уравнений движения

Методы интегрирования уравнений движения в молекулярной динамике. Сохранение интегралов и инвариантов. Симплектические схемы интегрирования. Методы оптимизации.

##### 4. Равновесные системы

Методы вывода молекулярно-динамической системы в равновесие. Моделирование различных статистических ансамблей.

##### 5. Неравновесные системы, релаксация

Примеры моделей неравновесных процессов на атомистическом уровне. Основные требования к моделированию релаксации.

##### 6. Параллельные вычисления

Применение параллельных вычислений к вопросам, рассмотренным в предыдущих разделах.

##### 7. Основы вычислительной квантовой механики

Детерминант Сдэтера, Молекулярные орбитали. Уравнения Хартри-Фока.

##### 8. Использование GRIG-технологий

Уравнение абстракции в технологии GRID.

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

компьютерный класс с удаленным доступом к вычислительному кластеру, доступ в Интернет (к фиксированному набору адресов) и мультимедийное оборудование (проектор).

#### 6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. М.: БХВ-Санкт-Петербург, 2004.
2. Антонов А.С., Параллельное программирование с использованием технологии MPI, М.: Изд. МГУ, 2004.

## Дополнительная литература

1. Dongarra J. et al., Sourcebook of parallel computing, Morgan-Kaufmann, 2003.
2. Стегайлов В.В., Норман Г.Э. Проблемы развития суперкомпьютерной отрасли в России: взгляд пользователя высокопроизводительных систем // Программные системы: теория и приложения. 2014. Т. 5. № 1(19). С. 111–152. URL: [http://psta.psis.ru/read/psta2014\\_1\\_111-152.pdf](http://psta.psis.ru/read/psta2014_1_111-152.pdf)
3. Weinan E., Principles of Multiscale Modeling, Cambridge University Press, 2011.
4. NIC Symposium 2014 Proceedings (12 –13 February 2014, Jülich, Germany), K. Binder, G. Münster, M. Kremer (Editors), John von Neumann Institute for Computing NIC Series, 2014.
5. Куксин А.Ю., Ланкин А.В., Морозов И.В., Норман Г.Э., Орехов Н.Д., Писарев В.В., Смирнов Г.С., Стариков С.В., Стегайлов В.В., Тимофеев А.В. ЗАЧЕМ и КАКИЕ нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса? Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении. // Программные системы: теория и приложения. 2014. Т. 5. № 1(19). С. 191–244. URL: [http://psta.psis.ru/read/psta2014\\_1\\_191-244.pdf](http://psta.psis.ru/read/psta2014_1_191-244.pdf)
6. Ефремов Р.Г., Шайтан К.В. Молекулярное моделирование нано- и биоструктур. Учебно-методический комплекс для магистров. - М., 2011. НОУДПО "Инсти-тут АйТи". - 129 с.
7. Schweitzer F., Browning Agents and Active Particles Collective Dynamics in the Natural and Social Sciences, Springer, 2003.
8. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: Научный Мир, 2013.
9. Leach A.R., Molecular modelling: principles and applications. Prentice Hall, 2001.
10. Voter A.F., Montalenti F., Germann T.C., Extending the time scale in atomistic simulation of materials // Annu. Rev. Mater. Res. 2002. V.32. P.321–46.
11. Marx D., Hutter J. Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods, Cambridge University Press, 2012.
12. Goedecker S., Scuseria G.E., Linear Scaling Electronic Structure Methods in Chemistry and Physics // Computing in Science & Engineering. 2003. V.5. P.14.
13. Becquart C.S., Wirth B.D., Kinetic Monte Carlo Simulations of Irradiation Effects, Comprehensive Nuclear Materials, (5 Volume Set), 2012.
14. Gibbon P., Sutmann G. Long-Range Interactions in Many-Particle Simulation. In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms (eds. J. Grotendorst, et al), Jülich: NIC, Vol. 10, pp. 467-506, 2002.
15. Sutmann G., Classical molecular dynamics. In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms (eds. J. Grotendorst, et al), Jülich: NIC, Vol. 10, pp. 211-254, 2002.
16. Рапапорт Д. К. Искусство молекулярной динамики. М.: РХД НИЦ, 2012.
17. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. Москва: Наука, 1977.

## 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)

- операционная система Linux;
- программный пакет LAMMPS;
- библиотеки математические BLAS, LAPACK и FFTW.

## 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 дисциплины, 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.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен	
<b>Разработчик:</b>	В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент, доцент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
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-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Квантовое атомистическое моделирование» обучающийся должен:

### знать:

знать принципы теоретико-вычислительного описания вещества на различных масштабных уровнях;

иметь базовые навыки применения программного обеспечения для численного решения задач на каждом из уровней;

знать принципы объединения различных масштабов для решения конкретных задач и иметь соответствующие навыки;

уметь оценивать вычислительную сложность поставленных задач и требуемых для их решения аппаратных ресурсов.

### уметь:

абстрагироваться от несущественного при решении прикладных задач;

пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач;

делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;

осваивать новые предметные области и вычислительные методики;

эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

навыками освоения большого объема информации;

навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;

культурой постановки и решения вычислительных задач.

## 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.

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

Вопросы к экзамену:

1. Суперкомпьютеры предэкзафлопсной эры. SIMD и MIMD стратегии параллелизации вычислений. Топология интерконнекта. Закон Мура.

2. Масштабируемость параллельных алгоритмов. Закон Амдала. Параллельная эффективность в «сильном» и «слабом» смысле.

3. Особенности обменов данными ключевых алгоритмов квантовой и классической молекулярной динамики.



4. Работа с данными при суперкомпьютерных расчетах многомасштабных моделей. Параллельный ввод и вывод данных. Обработка данных «на лету».
5. Классическая задача многих тел. Метод молекулярной динамики и другие методы частиц. Горизонт предсказуемости и стохастические свойства.
6. Эмпирические модели потенциалов межатомного взаимодействия. Парные потенциалы. Многочастичные потенциалы.
7. Центральные-симметричные и не центральные-симметричные модели. Силовые поля для молекулярных систем.
8. Методы построения огрубленных моделей потенциалов для сложных молекулярных систем.
9. Разделение динамики быстрых и медленных процессов. Схемы интегрирования, выделяющие медленные процессы.
10. Разделение моделей на «квантовую» и «классическую» части (методы QM/MM).
11. Объединение атомистического и континуального описания в рамках одной модели.
12. Расчеты энергетических барьеров для редких событий.
13. Радиационные повреждения твердых тел.
14. Разрушение и распространение трещин.
15. Молекулярные машины.
16. Свойства полимерных композитов.
17. Активное движение в сложных системах и самоорганизация.

Примеры экзаменационных билетов.

Пример 1.

1. Масштабируемость параллельных алгоритмов. Закон Амдала. Параллельная эффективность в «сильном» и «слабом» смыслах.
2. Свойства полимерных композитов.

Пример 2.

1. Методы построения огрубленных моделей потенциалов для сложных молекулярных систем.
2. Разделение динамики быстрых и медленных процессов. Схемы интегрирования, выделяющие медленные процессы.

#### 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 бала - 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 бала - 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 бала - 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 бал - 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**

При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.