

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Атомистические методы моделирования плазмы
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: Г.С. Демьянов

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 10.01.2025

Аннотация

Курс "Атомистические методы моделирования плазмы" предусматривает изучение основных принципов статистической физики, методов атомистического моделирования и их применения к анализу плазменных систем. Основное внимание уделено рассмотрению теоретических основ, численных методов и практических задач моделирования классических сильновзаимодействующих систем методами Монте-Карло и молекулярной динамики.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изучение ключевых принципов и методов атомистического моделирования для анализа плазменных систем, включая классические методы Монте-Карло и молекулярной динамики, а также основы применения интегралов по траекториям.

Задачи дисциплины

- освоение методов Монте-Карло и молекулярной динамики для расчета термодинамических свойств;
- изучение подходов к моделированию плазмы, включая дальнедействующие взаимодействия и метод Эвальда;
- понимание интегралов по траекториям и методов моделирования квантовых эффектов в плазменных системах.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
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

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- основные принципы классической и квантовой статистической физики, в том числе в формализме интегралов по траекториям;
- теоретические основы методов Монте-Карло и молекулярной динамики;
- особенности моделирования плазмы с дальнедействующими взаимодействиями.

уметь:

- проводить расчеты термодинамических величин на основе микроскопических параметров;
- применять методы Монте-Карло и молекулярной динамики для моделирования с коротко- и дальнедействующими потенциалами;
- анализировать структурные характеристики системы, такие как парная корреляционная функция и структурный фактор.

владеть:

- методами анализа плазменных систем с использованием современных программных средств;
- техниками обработки и интерпретации данных моделирования, а также оценки статистических ошибок;
- инструментами численного моделирования классических и квантовых одно- и двухкомпонентных кулоновских систем.

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	Основы классической статистической физики	2			4
2	Классические методы атомистического моделирования. Метод Монте-Карло и молекулярной динамики для сэмплирования конфигураций	2			4
3	Парная корреляционная функция, структурный фактор	2			4
4	Модель мягких и твердых сфер	2			4
5	Вопросы устойчивости и термодинамического предела плазмы	2			4
6	Сумма Слейтера, псевдопотенциалы	2			4
7	Дальнедействующие потенциалы, метод Эвальда	2			4
8	Соглашение о минимальном изображении. Усредненный по углам потенциал Эвальда	2			4
9	Однокомпонентная плазма, потенциал, энергия	2			4
10	Предел Дебая-Хюккеля для термодинамики однокомпонентной плазмы	2			4

11	Моделирование однокомпонентной плазмы с усредненным по углам потенциалом Эвальда методом Монте-Карло	2			4
12	Моделирование однокомпонентной плазмы с потенциалом Эвальда методом молекулярной динамики с помощью программы LAMMPS	2			4
13	Реализация усредненного по углам потенциала Эвальда в пакете LAMMPS	2			4
14	Интегралы по траекториям в термодинамике. Больцманноны	2			4
15	Статистическая сумма в случае статистики Ферми и Бозе. Проблема знаков	2			4
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

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

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основы классической статистической физики

Введение в атомистическое моделирование плазмы. Общие понятия и обзор методов, используемых в моделировании плазменных систем. Механический и термодинамический подход. Роль статистической физики в анализе плазмы. Примеры актуальных задач: исследование свойств материалов в экстремальных условиях, астрофизические применения.

2. Классические методы атомистического моделирования. Метод Монте-Карло и молекулярной динамики для сэмплирования конфигураций

Микроканонический и канонический ансамбли. Определение и различие между ансамблями. Понятие статсуммы, её роль в вычислении термодинамических величин. Выражение энергии, давления и энтропии через статсумму. Обсуждение теоремы вириала и её применения в атомистическом моделировании. Условия существования термодинамического предела.

3. Парная корреляционная функция, структурный фактор

Молекулярная динамика. Основные идеи молекулярной динамики (МД). Численные методы интегрирования уравнений движения (алгоритм Верле, метод Рунге-Кутты). Выбор временного шага. Анализ траекторий: расчёт температур, давлений и энергий. Термостаты для моделирования при постоянной температуре.

4. Модель мягких и твердых сфер

Методы Монте-Карло в моделировании. Основы метода Монте-Карло (МК): случайное сэмплирование конфигураций. Формирование цепей Маркова и алгоритм Метрополиса. Обсуждение сильных и слабых сторон метода.

5. Вопросы устойчивости и термодинамического предела плазмы

Эргодическая гипотеза и статистическое усреднение. Усреднение по времени и по ансамблю, их физическое значение. Методы анализа сходимости. Техника блочного среднего: выбор оптимального размера блоков, минимизация статистической ошибки.

6. Сумма Слейтера, псевдопотенциалы

Парная корреляционная функция и структурный фактор. Определение радиальной функции распределения (РФР), ее характерный вид в зависимости от фазы вещества. Связь РФР с потенциальной энергией и давлением. Определение структурного фактора через парную корреляционную функцию. Применение для анализа кристаллических и аморфных структур.

7. Дальнодействующие потенциалы, метод Эвальда

Модели взаимодействия частиц. Отличие потенциалов мягких и твердых сфер. Параметр неидеальности и вырождения, их физический смысл. Обсуждение термодинамического предела для короткодействующих потенциалов. Алгоритм Монте-Карло для моделирования системы мягких сфер.

8. Соглашение о минимальном изображении. Усредненный по углам потенциал Эвальда

Проблемы устойчивости и термодинамического предела для двухкомпонентной плазмы. Псевдопотенциалы и их роль в моделировании. Особенности расчёта суммы Слейтера.

9. Однокомпонентная плазма, потенциал, энергия

Дальнодействующие взаимодействия. Трудности моделирования систем с далекодействующими силами (кулоновское взаимодействие). Условная сходимость постоянных Маделунга. Метод суммирования Эвальда. Соглашение о минимальном изображении. Примеры применения в плазменных системах. Усредненный по углам потенциал Эвальда.

10. Предел Дебая-Хюккеля для термодинамики однокомпонентной плазмы

Модель однокомпонентной плазмы и ее приложения. Свойства однокомпонентной плазмы. Предел Дебая-Хюккеля. Реализация моделирования методом Монте-Карло. Радиальные функции распределения в зависимости от параметра неидеальности

11. Моделирование однокомпонентной плазмы с усредненным по углам потенциалом Эвальда методом Монте-Карло

Использование программных средств для молекулярной динамики. Введение в программу LAMMPS: основные возможности, установка и настройка. Пример задания параметров системы для моделирования однокомпонентной плазмы. Анализ выходных данных, построение графиков энергии, давления, РФР с помощью программы VMD и OVITO. Реализация сферически-симметричного потенциала.

12. Моделирование однокомпонентной плазмы с потенциалом Эвальда методом молекулярной динамики с помощью программы LAMMPS

Матрица плотности. Представление статистической суммы в виде интегралов по траекториям. Учет конечного размера частиц в моделировании. Идеальный и взаимодействующий газ бозе-газов.

13. Реализация усредненного по углам потенциала Эвальда в пакете LAMMPS

Матрица плотности неразличимых частиц. Статистика Ферми и Бозе. Статистическая сумма и энергия идеального Ферми газа. Моделирование Монте-Карло идеального Ферми газа.

14. Интегралы по траекториям в термодинамике. Больцманноны

Представление статистической суммы фермионов в виде интегралов по траекториям. Проблема знаков.

15. Статистическая сумма в случае статистики Ферми и Бозе. Проблема знаков

Взаимодействующий Ферми газ. Обменно-корреляционный функционал. Современные проблемы и перспективы квантового многочастичного моделирования взаимодействующих вырожденных систем.

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

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиа проектором, меловой или маркерной доской.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Рапапорт Д.К., Дьяконова А.Н. (пер. с англ.), Ефремов Р.Г. (науч. ред.). Искусство молекулярной динамики — М., Ижевск: Ин-т компьютер. исслед., 2012. — 630 с.
2. Гулд, Х., Тобочник, Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х ч.). Пер. с англ. А.Н. Полудова, В.А. Панченко. — М.: Мир, 1990. Ч. 1 — 349 с.; Ч. 2 — 399 с.
3. Фейнман, Р. Статистическая механика: курс лекций; пер. с англ. Н. М. Плакиды, Ю. Г. Рудого; под ред. Д. Н. Зубарева М.: Мир, 1975 — 407 с.

Дополнительная литература

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. В 10 т. Т. 5. Ч. 1. Статистическая физика: учеб. пособие для вузов / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского 6-е изд., стереотип. М. : Физматлит, 2013 — 620 с.
2. Френкель, Д. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям: [учебник для вузов] / Д. Френкель, Б. Смит; пер. с англ. и науч. ред. В. А. Иванов, М. Р. Стукан М. : Научный мир, 2013 — 578 с.
3. R.J. Sadus, Molecular Simulation of Fluids (Theory, Algorithms and Object-Orientation), Elsevier, New York, 1999.

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)

Не предусмотрены.

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 уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- выполнение заданий практических семинаров и самостоятельную обработку полученных результатов;
- активной самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- 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)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	<u>1</u>
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Дифференцированный зачет	
Разработчик:	Г.С. Демьянов

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
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 «Атомистические методы моделирования плазмы» обучающийся должен:

знать:

- основные принципы классической и квантовой статистической физики, в том числе в формализме интегралов по траекториям;
- теоретические основы методов Монте-Карло и молекулярной динамики;
- особенности моделирования плазмы с дальнедействующими взаимодействиями.

уметь:

- проводить расчеты термодинамических величин на основе микроскопических параметров;
- применять методы Монте-Карло и молекулярной динамики для моделирования с коротко- и дальнедействующими потенциалами;
- анализировать структурные характеристики системы, такие как парная корреляционная функция и структурный фактор.

владеть:

- методами анализа плазменных систем с использованием современных программных средств;
- техниками обработки и интерпретации данных моделирования, а также оценки статистических ошибок;
- инструментами численного моделирования классических и квантовых одно- и двухкомпонентных кулоновских систем.

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

В начале каждого занятия проводится краткий опрос по теме предыдущего занятия.

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

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Определение и различие микроканонического и канонического ансамблей. Роль статсуммы в вычислении термодинамических величин.
2. Теорема вириала и её применение в моделировании. Условия существования термодинамического предела.
3. Основные принципы метода Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса.
4. Эргодическая гипотеза. Усреднение по времени и по ансамблю, методы анализа сходимости.
5. Техника блочного среднего. Выбор оптимального размера блоков и минимизация статистической ошибки.
6. Радиальная функция распределения (РФР): физический смысл, методы расчёта и связь с термодинамическими величинами.
7. Структурный фактор: определение, свойства и применение для анализа структурных характеристик вещества.
8. Отличия потенциалов мягких и твёрдых сфер. Параметр неидеальности и его физический смысл.
9. Проблемы устойчивости двухкомпонентной плазмы. Псевдопотенциалы и их применение в моделировании.
10. Метода Эвальда. Соглашение о минимальном изображении. Расчёт усреднённого по углам потенциала Эвальда.
11. Предел Дебая-Хюккеля для однокомпонентной плазмы.
12. Основные свойства однокомпонентной плазмы. Радиальные функции распределения в зависимости от параметра неидеальности.
13. Использование программы LAMMPS для моделирования однокомпонентной плазмы. Постановка задачи и анализ выходных данных.
14. Матрица плотности и её связь с термодинамическими параметрами. Представление статистической суммы в виде интегралов по траекториям.
15. Идеальный и взаимодействующий газ Больцманов. Учет конечного размера частиц в моделировании.
16. Различия между статистиками Ферми и Бозе. Статистическая сумма и энергия идеального Ферми газа.
17. Проблема знаков в представлении статистической суммы фермионов в виде интегралов по траекториям. Перевзвешивание для обхода проблемы знаков.
18. Принципы моделирования взаимодействующего Ферми газа. Обменно-корреляционный функционал.
19. Современные проблемы квантового многочастичного моделирования. Применение к вырожденным системам.
20. Перспективы применения методов атомистического моделирования для анализа плазменных систем.

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

Оценка (дифференцированный зачет) выставляется за выполнение и сдачу всех домашних заданий по указанным вопросам (среднее арифметическое).