

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор

з науково-педагогічної роботи



Пантелеймонов А.В.

25 червня 2019 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ ОБРОБКИ ДАНИХ У ФІЗИЦІ

спеціальність:	105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітньо-наукова програма:	«Прикладна фізика енергетичних систем», «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики»
факультет	фізико-енергетичний

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізико-енергетичного факультету

“25” червня 2019 року, протокол № 6/19

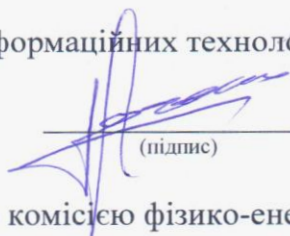
РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Лісін Д.О., к.т.н., доц. кафедри інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах

Програму схвалено на засіданні кафедри інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах

Протокол від “24” червня 2019 року № 6/19

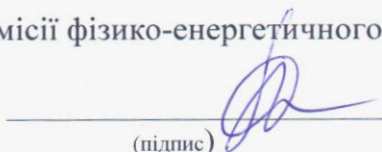
Завідувач кафедри інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах


_____ Немченко К.Е.
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією фізико-енергетичного факультету

Протокол від “25” червня 2019 року № 6/19

Голова методичної комісії фізико-енергетичного факультету


_____ Лісіна О.Ю.
(підпис)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Новітні технології обробки даних у фізиці” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки PhD, доктор філософії
(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

освітньо-наукова програма: «Прикладна фізика енергетичних систем», «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики»

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни: володіння сучасними професійними знаннями в області комп'ютерного моделювання молекулярних систем, методами обробки комп'ютерного експерименту і їх застосування для вирішення практичних завдань статистичної фізики молекулярних систем.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни: в результаті освоєння дисципліни аспірант повинен знати основні методи комп'ютерного моделювання (метод молекулярної динаміки, метод броунівський динаміки, метод Монте-Карло), основні принципи побудови та роботи алгоритмів і набору статистики в комп'ютерному моделюванні; вміти обробляти дані комп'ютерного експерименту; знати методи розрахунку точок фазових переходів і критичних показників в комп'ютерному експерименті.

1.3. Кількість кредитів 12

1.4. Загальна кількість годин 360

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / <u>за вибором</u>	
Вид кінцевого контролю залік(I семестр), екзамен (II семестр)	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	-й
Семестр	
3-й та 4-й	-й
Лекції	
72 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
год.	год.
Самостійна робота	
288 год.	год.

1.6. Заплановані результати навчання

В результаті освоєння дисципліни студент повинен:

знати основні методи комп'ютерного моделювання (метод молекулярної динаміки, метод броунівський динаміки, метод Монте-Карло), основні принципи побудови та роботи алгоритмів і набору статистики в комп'ютерному моделюванні;
 вміти обробляти дані комп'ютерного експерименту;
 володіти методами розрахунку точок фазових переходів і критичних показників в комп'ютерному експерименті;
 мати досвід діяльності з проведення комп'ютерного експерименту і обробці його результатів.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Загальний вступ

Тема 1. Роль комп'ютерного експерименту (КЕ) в статистичній фізиці. Стохастичні й детерміністичні методи моделювання. Загальні зауваження про моделі, алгоритми, способи усереднення за часом і ансамблю, проблеми ергодичності, одиниці виміру часу і довжини в КЕ, виборі кроку зміщення, критерії досягнення рівноваги. Загальні положення про вибір потенціалів, про періодичні граничні умови і про метод найближчого образу.

Розділ 2. Комп'ютерне моделювання простої рідини методом молекулярної динаміки

Тема 1. Метод молекулярної динаміки для моделювання рідин (низькомолекулярні системи). Різностні схеми для розв'язку системи рівнянь Ньютона. Алгоритм Верле в швидкісній формі.

Тема 2. Алгоритм молекулярної динаміки для різних ансамблів (мікроканонічного, канонічного, NPT-ансамблю). Оптимізація і прискорення обчислень.

Тема 3. Обробка результатів КЕ. Усереднення вимірюваних величин. Кореляційні функції.

Розділ 3. Комп'ютерне моделювання простої рідини методом Монте-Карло

Тема 1. Метод Монте Карло (для простих рідин). Загальна методологія.

Тема 2. Моделювання різних ансамблів (мікроканонічного - алгоритм "демона", канонічного - алгоритм Метрополіс, великого канонічного). Динамічна інтерпретація методу Монте-Карло.

Тема 3. Метод броуновської динаміки (для рідин). Ланжевенівська динаміка.

Розділ 4. Задача перколяції.

Тема 1. Задача про перколяцію. Моделювання методом Монте-Карло.

Тема 2. Застосування методів скінченномірного масштабування для аналізу результатів КЕ. Обчислення критичних показників. "Геометричні" критичні явища.

Розділ 5. Модель Ізінга

Тема 1. Вивчення властивостей магнітних систем в околиці фазового переходу в КЕ. Одновимірні і двовимірні моделі Ізінга.

Тема 2. Скінченномірне масштабування в моделі Ізінга. Метод мультіканонічного моделювання.

Розділ 6. Моделювання фазового переходу рідина-газ.

Тема 1. Комп'ютерне моделювання фазового переходу рідина-газ. Порівняння МД і МК в різних ансамблях. Моделювання кристалізації в системі твердих куль.

Тема 2. Просторові і часові масштаби в полімерних системах. Загальний огляд методів моделювання. Загальний огляд точних і більш грубих моделей.

Тема 3. Моделювання фазових переходів в полімерних системах на прикладі фазового розшарування в суміші двох різних полімерів. Застосування методів скінченномірного масштабування для вивчення фазових переходів за допомогою КЕ. Метод аналізу і перерахунку гістограм як найбільш ефективний метод вилучення максимально повної інформації.

Тема 4. Інші фазові переходи в полімерах: перехід клубок-кулька, розшарування полімер-розчинник, ЖК впорядкування, мікрофазное розшарування в системах сополімерів, адсорбція на поверхні і на межі розділу змішуються розчинників, змочування, стеклування.

Тема 5. Приклади дослідження систем малих розмірів, з якими працюють фахівці в галузі нанотехнологій. Тонкі плівки, поверхні, нанокластери, молекулярні мотори.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	у тому числі						у тому числі					
	л	п	лаб.	інд.	с. р.	л	п	лаб.	інд.	с. р.		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<i>Розділ 1. Загальний вступ</i>												
Тема 1. Роль комп'ютерного експерименту (КЕ) в статистичній фізиці. Стохастичні й детерміністичні методи моделювання. Загальні зауваження про моделі, алгоритми, способи усереднення за часом і ансамблю, проблеми ергодичності, одиниці виміру часу і довжини в КЕ, виборі кроку зміщення, критерії досягнення рівноваги. Загальні положення про вибір потенціалів, про періодичні граничні умови і про метод найближчого образу.	11	2				9						
Разом за розділом 1	5	2				3						
<i>Розділ 2. Комп'ютерне моделювання простої рідини методом молекулярної динаміки</i>												
Тема 1. Метод молекулярної динаміки для моделювання рідин (низькомолекулярні системи). Різностні схеми для розв'язку системи	11	2				9						

рівнянь Ньютона. Алгоритм Верле в швидкісній формі.												
Тема 2. Алгоритм молекулярної динаміки для різних ансамблів (мікроканонічного, канонічного, NPT-ансамблю). Оптимізація і прискорення обчислень.	11	2				9						
Тема 3. Обробка результатів КЕ. Усереднення вимірюваних величин. Кореляційні функції.	11	2				9						
Разом за розділом 2	72	15				57						
<i>Розділ 3. Комп'ютерне моделювання простої рідини методом Монте-Карло</i>												
Тема 1. Метод Монте Карло (для простих рідин). Загальна методологія.	11	2				9						
Тема 2. Моделювання різних ансамблів (мікроканонічного - алгоритм "демона", канонічного - алгоритм Метрополіс, великого канонічного). Динамічна інтерпретація методу Монте-Карло.	11	2				9						
Тема 3. Метод броунівської динаміки (для рідин). Ланжевенівська динаміка.	11	2				9						
Разом за розділом 3	72	15				57						
<i>Розділ 4. Задача перколяції.</i>												
Тема 1. Задача про перколяцію. Моделювання методом Монте-Карло.	11	2				9						
Тема 2. Застосування методів скінченномірною масштабування для аналізу результатів КЕ. Обчислення критичних показників. "Геометричні" критичні явища.	11	2				9						
Разом за розділом 4	50	12				38						
<i>Розділ 5. Модель Ізінга</i>												
Тема 1. Вивчення властивостей магнітних	11	2				9						

систем в околиці фазового переходу в КЕ. Одновимірні і двовимірні моделі Ізінга.												
Тема 2. Скінченномірне масштабування в моделі Ізінга. Метод мультіканонічного моделювання.	11	2				9						
Разом за розділом 5	50	12				38						
<i>Розділ 6. Моделювання фазового переходу рідина-газ.</i>												
Тема 1. Комп'ютерне моделювання фазового переходу рідина-газ. Порівняння МД і МК в різних ансамблях. Моделювання кристалізації в системі твердих куль.	11	2				9						
Тема 2. Просторові і часові масштаби в полімерних системах. Загальний огляд методів моделювання. Загальний огляд точних і більш грубих моделей.	11	2				9						
Тема 3. Моделювання фазових переходів в полімерних системах на прикладі фазового розшарування в суміші двох різних полімерів. Застосування методів скінченномірного масштабування для вивчення фазових переходів за допомогою КЕ. Метод аналізу і перерахунку гістограм як найбільш ефективний метод вилучення максимально повної інформації.	11	2				9						
Тема 4. Інші фазові переходи в полімерах: перехід клубок-кулька, розшарування полімер-розчинник, ЖК впорядкування, мікрофазне розшарування	12	3				9						

в системах сополімерів, адсорбція на поверхні і на межі розділу змішуються розчинників, змочування, стеклування.											
Тема 5. Приклади дослідження систем малих розмірів, з якими працюють фахівці в галузі нанотехнологій. Тонкі плівки, поверхні, нанокластери, молекулярні мотори.											
Разом за розділом 6	111	16				95					
Усього годин	360	72				288					

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Робота з лекційним матеріалом. Повторення поняття ергодичності за матеріалами курсу молекулярної фізики	36
2	Повторення методів чисельного рішення систем рівнянь в приватних похідних. Робота з лекційним матеріалом.	36
3	Повторення матеріалу про статистичні ансамблі з курсу молекулярної фізики. Самостійне вивчення матеріалу про броунівський рух. Робота з лекційним матеріалом.	36
4	Розрахунок рівняння стану простий рідини з використанням комп'ютерної програми молекулярної динаміки. Робота з лекційним матеріалом.	36
5	Повторення матеріалу про центральній граничній теоремі теорії ймовірності. Робота з лекційним матеріалом.	36
6	Самостійне повторення матеріалу про фазові переходи і критичні явища. Значення критичних показників для різних моделей. Робота з лекційним матеріалом.	36
7	Системи малих розмірів, з якими працюють фахівці в галузі нанотехнологій. Робота з лекційним матеріалом.	36
8	Мікрофазне розшарування в системах сополімерів Робота з лекційним матеріалом.	36
	Разом	288

6. Індивідуальні завдання

Не передбачені

7. Методи контролю

Питання на залікову та екзаменаційну роботи:

- 1) як задається модель простий рідини і які існують вклади в гамільтоніан взаємодії;
- 2) як задається модель полімерної системи і які існують вклади в гамільтоніан взаємодії;
- 3) перерахуйте відомі вам універсальні і неуніверсальні властивості полімерних систем;
- 4) перерахуйте характерні просторові і часові масштаби в полімерних системах;
- 5) метод молекулярної динаміки для простої рідини і для полімерних систем - розповісти, в чому він полягає, і привести приклад різницевої схеми;
- 6) метод Монте-Карло для моделювання простий рідини і для полімерних систем в канонічному ансамблі (алгоритм Метрополіс) - розповісти, в чому він полягає, і окремо вписати і пояснити умови детального балансу;
- 7) алгоритм простий вибірки для побудови одиночного ланцюга без самоперетинів;
- 8) алгоритм Розенблют для побудови одиночного ланцюга без самоперетинів;
- 9) перерахуйте відомі вам статистичні ансамблі і напишіть статсумму, функцію розподілу і термодинамічний потенціал для кожного з них;
- 10) континуальні моделі для дослідження полімерних систем за допомогою динамічного методу Монте-Карло;
- 11) ґраткові моделі для дослідження полімерних систем за допомогою динамічного методу Монте-Карло (модель ланцюга з флуктуруючою довжиною зв'язків);
- 12) моделювання фазового переходу клубок-кулька: три способи визначення тета-точки,
- 13) що є параметром порядку в задачі про перехід клубок-кулька? як визначити температуру переходу клубок-кулька в КЕ?
- 14) моделювання фазового переходу рідка кулька - тверда кулька за допомогою методу Монте-Карло в розширеному ансамблі; що є параметром порядку для переходу рідка-тверда кулька?
- 15) формула для статсумми довільного розширеного ансамблю в загальному вигляді;
- 16) метод мультіканонічного моделювання (на прикладі моделі Ізінга);
- 17) алгоритм Ландау-Ванга для розрахунку щільності станів;
- 18) моделювання фазового розшарування полімер-розчинник за допомогою методу Монте-Карло в великому канонічному ансамблі; алгоритм «з конфігураційним зміщенням вибірки» для вставки і видалення ланцюгів в великому канонічному ансамблі;
- 19) формула для розрахунку радіуса інерції полімерного ланцюга;
- 20) як обчислити середню деякої спостережуваної величини (наприклад, середній радіус інерції) в комп'ютерному експерименті?
- 21) як обчислити коефіцієнт дифузії в комп'ютерному експерименті? нормальна і аномальна дифузія;
- 22) парна кореляційна функція щільності (парна радіальна функція розподілу): як обчислити її в комп'ютерному експерименті; як вона виглядає для рідини і для кристала?
- 23) статичний структурний фактор розсіювання для всієї системи і для окремої полімерного ланцюга: як він виглядає, яку інформацію можна з нього витягати?
- 24) метод дисипативної динаміки частинок;
- 25) метод скінченномірною масштабування (на прикладі моделі Ізінга);
- 26) що потрібно робити для того, щоб реалізувати повну схему мультимасштабного моделювання (як використовувати інформацію про атомістичну будову полімеру на наступних етапах огрубіння моделі); приведіть який-небудь приклад;
- 27) комп'ютерне моделювання розведених полімерних розчинів методом Монте-Карло; ґраткові і континуальні моделі одиночного полімерного ланцюга (блукання без самоперетинів); статичні і динамічні алгоритми;

- 28) періодичні граничні умови і метод найближчого образу;
- 29) Загальна схема комп'ютерного експерименту.
- 30) Різничні схеми для розв'язку рівнянь руху (в тому числі, алгоритм Верле).
- 31) Усереднення спостережуваних величин за часом і по ансамблю.
- 32) Розрахунок енергії, тиску, парної радіальної функції розподілу щільності, коефіцієнта дифузії.
- 33) Облік взаємодій: список Верле, метод пов'язаного списку.
- 34) Алгоритм молекулярної динаміки для канонічного ансамблю. Алгоритми молекулярної динаміки для канонічного ансамблю. Алгоритми ізотермо-ізобарічеської молекулярної динаміки.
- 35) Проста вибірка і вибірка по значимості. Умова детального балансу (мікроскопічної оборотності).
- 36) Алгоритм Метрополіс для канонічного ансамблю. Алгоритм методу Монте-Карло для інших ансамблів. Алгоритми зі зміщенням вибірки.
- 37) Метод броунівський динаміки.
- 38) Задача перколяції: модель, параметр порядку, поріг перколяції, критичні показники, залежність параметра порядку та інших спостережуваних величин від ймовірності заняття одного осередку, методи визначення порогу перколяції і критичних показників, метод скінченномірного масштабування.
- 39) Модель Ізінга: модель, параметр порядку, точка Кюрі, критичні показники, залежно параметра порядку та інших спостережуваних величин від температури, методи визначення порогу перколяції і критичних показників, метод скінченномірного масштабування.
- 40) Комп'ютерне моделювання фазового переходу рідина - газ. Фазова діаграма. Рівняння стану. Параметр порядку. Вигляд функції розподілу для параметра порядку при температурах вище і нижче критичної. Формули залежності параметра порядку і ізотермічні

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання										Сума
P1	P2	P3	P4	P5	P6	Контрольна робота	Індивідуальне завдання	Разом	Залікова/екзамен аційна робота	
12	24	24				-		60	40	100
			15	15	30			60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література

Основна література

1. Х.Гулд, Я.Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. В 2-ух томах, Москва, Мир, 1990.
2. Д.Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в статистической физике. Перевод с англ., "Наука", Москва, 1990.
3. К.Биндер, Д.Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Перевод с англ., "Наука", Москва, 1995.
4. М.Р.Allen, D.J.Tildesley. Computer simulation of liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.
5. D.Frenkel, B.Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications. Academic Press, 2002.
6. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation. New York: Cambridge University Press, 1995.
7. В.А.Иванов, Краткий конспект по курсу лекций «Компьютерное моделирование полимерных систем» (методическая разработка), 2012.
8. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / Отв. ред. В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. — 688 с., цв. вкл.

Допоміжна література

1. Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Science. K.Binder (ed.), Oxford University Press, 1995.
2. Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems, edited by K.Binder and G.Ciccotti, (proceedings of the conference in Como, Italy), 1996.
3. Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology. Ferrario M., Ciccotti G., Binder K. (Eds.). V.1. (Lecture Notes in Physics, v.703). Berlin-Heidelberg: Springer, 2006. 711 p; V.2. (Lecture Notes in Physics, v. 704). Berlin-Heidelberg: Springer, 2006. 598 p.
4. Simulation Methods for Polymers, edited by M. Kotelyanskii, D. N. Theodorou, Marcel Decker, Inc., New York, 2004, 602 pages.
5. Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems. Eds. Binder K., Ciccotti G. Conference Proceedings, V.49 (Proceedings of the Euroconference on Computer Simulation in Condensed Matter Physics and Chemistry, 3-28 July 1995, Como, Italy), Italian Physical Society (Societa Italiana di Fisica), Bologna, 1996. 958 p.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. <http://venec.ulstu.ru/> - електронна бібліотека повнотекстових навчальних та наукових видань УЛГТУ
2. <http://window.edu.ru/> - інформаційна система "Єдине вікно доступу до освітніх ресурсів"
3. <http://poiskknig.ru> – електронна бібліотека підручників Мех-Мат МГУ, Москва
4. <http://www.mathnet.ru.ru/> - російський математичний портал
5. <http://www.lib.mexmat.ru> – електронна бібліотека механіко-математичного факультету Московського державного університету
6. <http://onlinelibrary.wiley.com> - наукові журнали видавництва Wiley&Sons
7. <http://www.sciencedirect.com/> - наукові журнали видавництва Elsevier