

Э.В. Дюльдина, Б.Р. Гельчинский
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ И ХИМИИ
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ: МЕТОДЫ, АЛГОРИТМЫ, УЧЕБНЫЕ
ЗАДАНИЯ

e.dyuldina@mail.ru

МГТУ им. Г.И. Носова, Магнитогорск; ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург

Presented a special course aimed at mastering the students basic knowledge of the possibilities and limitations of computer simulation in general and in condensed matter physics and chemistry in particular. A review of methods and algorithms for simulation of atomic structure and physical properties of materials, such as Monte Carlo and molecular dynamics and their modifications. Consider the examples of application of these techniques to describe the atomic structure and the wide range of physical properties of condensed matter (crystals, amorphous materials, liquids, dense plasma). A review of methods for calculating the interatomic forces, including energy methods and calculations of effective Hamiltonians. Practical lessons on a special course include assignments for students to model a number of micro-and macroscopic properties and tasks for programming methods for calculating the properties of the simulation results.

Основные области применения компьютеров – это информационные системы и средства коммуникации; автоматизация и управление различными видами человеческой деятельности; математическое моделирование объектов и процессов разнообразной природы.

Эти три сферы применения вычислительной техники неразделимы, и их дальнейший синтез неизбежен. Фактически мы всегда в той или иной степени имеем дело со всеми тремя сферами.

Следует говорить о неизбежности применения вычислительного эксперимента в самых различных областях науки и техники. Опыт показывает, что метод математического моделирования соединяет в себе преимущества традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования, синтезирует знания и усилия ученых различных специальностей, стимулирует фундаментальные исследования, удешевляет и убыстряет НИОКР.

Что такое вычислительный эксперимент? Ядро вычислительного эксперимента составляет триада "модель – алгоритм – программа", а сущность его лучше всего понять на примере задач физики и химии. Для студентов необходимо дать систематические знания о возможностях и ограничениях при использовании вычислительного эксперимента вообще и в физике и химии конденсированного состояния в частности. Изложить обзор методов и алгоритмов моделирования атомной структуры и физических свойств материалов, таких как методы Монте-Карло и молекулярная динамика и их модификации. Рассмотреть примеры применения этих методов для описания атомной структуры и широкого круга физических свойств веществ в конденсированном состоянии (кристаллы, аморфные материалы, жидкости, плотная плазма). Поскольку методы моделирования требуют знания характера межчастичного взаимодействия в исследуемых системах, необходимо дать обзор способов их расчета, включая энергетические методы и расчеты эффективных гамильтонианов. Кроме того, следует описать возможности более глубокого анализа данных моделирования путем статистико-геометрического анализа атомной структуры методами многогранников Вороного и симплексов Делоне.

Содержание спецкурса:

1. Введение
2. Вычислительные эксперименты в различных областях науки и техники.
3. Возможности математического (компьютерного) моделирования (ММ) в физике и химии конденсированного состояния.
4. Методы моделирования атомной структуры и физико-химических свойств материалов.
 - 4.1. метод Монте-Карло (МК).
 - 4.2. метод Молекулярной динамики (МД).
5. Методы расчета потенциалов межчастичного взаимодействия для моделирования и численные методы расчета атомной и электронной структуры:
 - 5.1. вычисления эффективных потенциалов: эмпирические методы, метод псевдопотенциала (модельный и априорный);
 - 5.2. приближение эффективной среды и метод погруженного атома;
 - 5.3. статистико-геометрический анализ атомной структуры методами многогранников Вороного и симплексов Делоне.
6. Задания по моделированию и задачи для программирования методов расчета свойств по результатам ММ
7. Семинары и коллоквиумы.
8. Защита курсовых работ.

Примерные задания для курсовых работ.

1. Реализовать алгоритм МД для двумерной системы из 64 частиц
2. Реализовать алгоритм МД для трехмерной системы из 128 частиц
3. Используя программу МД, вычислить ФРП и функцию Ван Хофа.
4. Вычислить коэффициент самодиффузии по данным МД о квадрате смещения.
5. Вычислить коэффициент самодиффузии по автокорреляционной функции скорости методом МД.
6. Моделирование броуновской динамики при постоянной температуре для Леннард-Джонсовской системы.
7. Реализовать алгоритм Метрополиса МК.
8. Реализовать алгоритм возвратного МК.
9. Модель Изинга методом МК.
10. Перколяция методом МК и ее применение для оценки электропроводности, скорости химической реакции и т.п.
11. Рост фрактальных структур, генерированных стохастическим образом.

Библиографический список

1. *Биндер К., Хеерман Д.В.* Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. – М.: Наука, 1995.
2. *Голд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). – М.: Мир, 1990.

3. Компьютеры, модели, вычислительный эксперимент. Введение в информатику с позиций математического моделирования. – М.: Наука, 1988. (Серия “Кибернетика – неограниченные возможности и возможные ограничения).
4. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
5. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. -Oxford: Clarendon, 1987.

В.И. Козлова
ИНТЕРНЕТ-ПОРТАЛ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИЙ РАБОТУ СЕТИ ЦЕНТРОВ
КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ НАУЧНЫМ ОБОРУДОВАНИЕМ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Nika-teen@yandex.ru
НИЯУ МИФИ, Москва

This article connected with the problem of informatization of science and education. In Russia, there is a network of «centers for collective use of scientific equipment». These centers are designed to provide access to a wide range external users of unique equipment, including undergraduate and graduate students for educational purposes. Due to the development of high technologies and automated systems the interactive automated information system has been decided to create. It will be Internet portal where any potential user might find required unique scientific equipment or services and to contact the appropriate center. In addition, the system will collect a unique date information about scientific equipment base of the Russian Federation for government.

Научно-исследовательская и образовательная деятельность являются одними из важнейших сфер общественной жизни. Одним из подходов к развитию этих сфер является информатизация научной и образовательной деятельности.

Ключевым звеном научной инфраструктуры являются исследовательское оборудование и комплексы. В силу высокой стоимости приборов и специфики решаемых исследовательских задач особое значение приобретает обеспечение организациями – держателями оборудования доступа к нему широкого круга внешних пользователей, в том числе студентов и аспирантов. В этих целях создана и функционирует сеть центров коллективного пользования научным оборудованием (далее – ЦКП). Одной из основных целей создания ЦКП является обеспечение проведения исследований, испытаний и измерений заинтересованным пользователям. Также немаловажную роль играет процесс предоставления образовательных услуг на данном оборудовании.

Пользователями могут являться как представители базовой организации центра, так и внешние заказчики. Именно для внешних пользователей крайне затруднен доступ к необходимому оборудованию, сосредоточенному в объектах научной инфраструктуры. Процесс поиска, связи и переговоров с владельцами оборудования требует больших трудозатрат и «бумажной волокиты», что является тормозом образовательного процесса, научных исследований и разработок.

В связи с развитием наукоемких технологий и автоматизированных информационных систем найдено решение этой проблемы в создании интерактивной автоматизированной информационной системы. АИС по обеспечению работы сети центров коллективного пользования Российской Федерации будет размещена на Интернет-портале, что позволит молодым исследователям, студентам и аспирантам, научным и научно-педагогическим