

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине

Компьютерное моделирование многоатомных систем

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки :
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-3 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности.

ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

ПК-3 Способен разрабатывать алгоритмы и программы, применять методы компьютерного моделирования для решения задач профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 3.2 Применяет общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных

ИПК 1.2 Владеет практическими навыками использования современных методов исследования в выбранной области

ИПК 3.1 Знает основы программирования, владеет навыками создания компьютерных моделей физических явлений и процессов

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

I. По дисциплине «Фрактальные структуры» предусмотрены тесты по разделам: Темы 1-6 и Темы 7-8 (ИПК 1.2, ИПК 3.1, ИОПК 3.2). Тесты размещены в системе LMS Moodle ТГУ (Learning Management System Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment) по ссылкам: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=29192> и <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=25858>

Тесты по курсу составлены на основе банка вопросов в курсе Moodle.

Пример теста к Темам 1-6 курса.

1. Вопрос: Какой потенциал из приведённых лучше использовать для моделирование структур со свойствами кремния?

- а) Потенциал Стиллинджера-Вебера
- б) Потенциал Леннарда-Джонса
- в) Потенциал Терзоффа
- г) Потенциал Букингема

2. Какой параметр мы **НЕ** можем изменять в процессе моделирования методом МД?

- а) Объём
- б) Давление
- в) Температуру
- г) Энергию межатомного взаимодействия
- д) Число атомов

Ключи: 1 в); 2 г) (50%), д) (50%)

Критерии оценивания: Прохождение теста при правильном ответе (100%) оценивается в 1 балл. Максимальная оценка 100%. Набранные баллы вычисляются системой.

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Зачет в 7 семестре проводится в устной форме по экзаменационным билетам.

Экзаменационный билет состоит из двух частей.

Первая часть содержит два теоретических вопроса, проверяющих ИПК 3.1 и ИПК 1.2. Ответы на вопросы даются в развернутой форме. После ответа на билет студент отвечает на уточняющие и дополнительные вопросы из открытого перечня вопросов экзаменационных билетов.

Вторая часть проверяет ИОПК 3.2 и представляет собой задачу по расшифровке текст скрипта для моделирования физического процесса. Решением задачи является объяснение каждой из команд и её параметров. Ответ даётся в устной форме.

Открытый перечень вопросов, выносимых на зачет.

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям
2. Основы метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Ограничения метода.
3. Парные потенциалы. Достоинства и недостатки.
4. Многочастичные потенциалы. Потенциал Стиллинджана-Вебера.
5. Потенциалы для материалов с ковалентной связью. Потенциал Терзоффа
6. Алгоритм Верле. Метод чехарды. Метод Верле со скоростями
7. Термостат Берендсена. Термостат Андерсена. Термостат Нозе-Гувера. Достоинства и недостатки термостатов.
8. Баростат Берендсена. Баростат Андерсена. Достоинства и недостатки баростатов.
9. Расчёт внутренней энергии и температуры. Расчёт Давления.
10. Расчёт теплоёмкости. Определение энтропии. Определение свободной энергии
11. Радиальная функция распределения. Примеры графиков для материалов в различном агрегатном состоянии.
12. Расчёт диффузии. Среднеквадратичное смещение атомов. Автокорреляция скоростей.

Пример задачи:

Задача 1. Дать пояснения по командам в скрипте:

```
units      metal
atom_style atomic
boundary   s s s
lattice    fcc 3.615
region     box block 0 10 0 24 0 10
create_box 1 box
create_atoms 1 box
region     rtop block 0 10 22.01 24 0 10
region     rbottom block 0 10 0 1.99 0 10
group      gtop region rtop
group      gbottom region rbottom
pair_style  eam/alloy
pair_coeff   * * Cu_mishin1.eam.alloy Cu
velocity    all create 600 87287
fix         1 all nve
fix         sft gtop setforce 0 0 0
fix         sfb gbottom setforce 0 0 0
velocity    gtop set 0 -0.1 0 sum no mom yes rot yes units box
velocity    gbottom set 0 0.1 0 sum no mom yes rot yes units box
dump        id all atom 500 dump.melt
thermo      50
timestep    0.001
run         100000
```

Критерии оценивания:

Результаты зачёта определяются оценками «зачет», «незачет».

Оценка «зачет» выставляется, если дан развернутый ответ на теоретические вопросы и правильно решена задача.

Оценка «незачет» выставляется, если не даны ответы на теоретические вопросы и/или не решена задача.

Зачёт с оценкой в восьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть содержит три вопроса, проверяющих ИПК 1.2 и ИПК 3.1. Ответ на вопросы первой части даётся в развёрнутой форме. После ответа на билет студент отвечает на уточняющие и дополнительные вопросы из открытого перечня вопросов экзаменационных билетов, тестов.

Вторая часть представляет собой задачу, проверяющую сформированность компетенции ОПК-3 в соответствии с индикатором ИОПК-3.2. Решение задачи второй части предоставляется в виде текста скрипта.

Открытый перечень вопросов, выносимых на зачет с оценкой.

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям
2. Основы метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Ограничения метода.
3. Парные потенциалы. Достоинства и недостатки.
4. Многочастичные потенциалы. Потенциал Стиллинджена-Вебера.
5. Потенциалы для материалов с ковалентной связью. Потенциал Терзоффа
6. Алгоритм Верле. Метод чехарды. Метод Верле со скоростями
7. Термостат Берендсена. Термостат Андерсена. Термостат Нозе-Гувера. Достоинства и недостатки термостатов.
8. Баростат Берендсена. Баростат Андерсена. Достоинства и недостатки баростатов.
9. Расчёт внутренней энергии и температуры. Расчёт Давления.
10. Расчёт теплоёмкости. Определение энтропии. Определение свободной энергии
11. Радиальная функция распределения. Примеры графиков для материалов в различном агрегатном состоянии.
12. Расчёт диффузии. Среднеквадратичное смещение атомов. Автокорреляция скоростей.
13. Метод Монте-Карло. Организация моделирования.
14. Генераторы случайных чисел.
15. Примеры решения задач методом Монте-Карло. Определение площади круга. Вычисление интеграла. Задача о перколяции.
16. Выборка по значимости. Алгоритм Метрополиса.
17. Алгоритм метода Монте-Карло. Пробные шаги смещения.
18. Моделирование различных ансамблей методом Монте-Карло.
19. Функционал электронной плотности.
20. Теоремы Хоэнберга – Кона. Система уравнений Кона – Шэма.

Пример задачи:

Задача 1. Заменить в скрипте словесное описание выполняемых действий на команды для программного пакета LAMMPS.

Критерии оценивания:

Результаты зачёта определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»

Оценка «отлично» выставляется, если дан развернутый ответ на теоретические вопросы, даны ответы на дополнительные вопросы, правильно решена задача.

Оценка «хорошо» выставляется, если дан ответ на теоретические вопросы, даны ответы на дополнительные вопросы, в решении задачи допущено не более двух ошибок.

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если дан ответ на теоретические вопросы, нет ответа на дополнительные вопросы, в решении задачи допущено не более 4 ошибок.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется во всех остальных случаях.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Тест

1. Соотнесите между собой названия и формулы распределений (ИПК 3.1)
 - а) $P[X=0]=p, P[X+1]=q$ 1) Геометрическое распределение
 - б) $P(X=m)=n!/((n-m)!m!)\cdot p^m\cdot(1-p)^m$ 2) Распределение Бернулли
 - в) $P[X=m]=\exp(-\lambda)\cdot\lambda^m/m!$ 3) Биноминальное распределение
 - г) $P_m=q^m\cdot p$ 4) Распределение Пуассона
2. В теории вероятности существует несколько базовых понятий. Одно из них - испытание. Испытание – это некоторый эксперимент, последовательность действий, имеющих тот или иной результат. Свяжите между собой другие понятия и их определения (ИПК 3.1):
 - а) Результат испытания
 - б) Значение, ассоциированное со случайным событием 1) Случайная величина
 - в) Переменная, принимающая значение на множестве случайных значений, связанных с испытанием 2) Событие
 - 3) Случайное число
3. Какие алгоритмы интегрирования уравнений движения **НЕ** рекомендуется использовать? (ИПК 3.1):
 - а) Верле
 - б) Эйлера
 - в) Чехарды
 - г) Верле со скоростями
4. При подключении к серверу с операционной системой Linux у Вас просят ввести логин и пароль. Но когда вводите пароль, то не появляются символы. Что вы сделаете? (ИПК 1.2):
 - а) Попробую поменять раскладку клавиатуры.
 - б) Перезапущу программу и попробую снова подключиться.
 - в) Перезагружу компьютер.
 - г) Продолжу вводить пароль, т.к. система ничего и не должна писать.
5. Какой командой можно задать вывод данных в файл в процессе выполнения команды run? (ИОПК 3.2):
 - а) dump
 - б) print
 - в) fix print
 - г) thermo
6. Какой командой из консоли можно запустить выполнение скрипта в LAMMPS? (ИПК 1.2):
 - а) `lmp -in имя_скрипта`

- б) `lmp имя_скрипта`
 - в) `lmp < имя_скрипта`
 - г) `lmp > имя_скрипта`
 - д) `mpirun -np 1 lmp -in имя_скрипта`
7. Что **НЕ** задаётся в процессе инициализации системы. (ИПК 3.1):
- а) Координаты частиц
 - б) Скорости частиц
 - в) Температура системы
 - г) Силы, действующие на частицы
8. Выберите **нефизичные** методы для моделирования канонического ансамбля (ИПК 3.1):
- а) Термостат Андерсена
 - б) Термостат Нозе-Гувера
 - в) Термостат Берендсена
 - г) Метод масштабирования скоростей
9. Что означает число 125 в команде `velocity all create 300 125`? (ИОПК 3.2):
- а) Количество атомов
 - б) Скорость атомов
 - в) Кинетическая температура атомов
 - г) Случайное число
10. Каким символом обозначают комментарии в скрипте для LAMMPS? (ИОПК 3.2):
- а) `//`
 - б) `#`
 - в) `&`
 - г) `%`
11. Какие величины можно рассчитать с применением временной корреляционной функции? (ИПК 3.1):
- а) Радиальное распределение атомов
 - б) Диффузия
 - в) Вязкость
 - г) Давление
12. Какой потенциал из приведённых лучше использовать для моделирование структур со свойствами кремния? (ИПК 3.1):
- а) Потенциал Леннарда-Джонса
 - б) Потенциал Букингема
 - в) Потенциал Терзоффа
 - г) Потенциал Стиллинджера-Вебера
13. Какой `fix` командой можно задать нагрев системы? (ИОПК 3.2):
- а) `nvt`
 - б) `heat`
 - в) `nve`
 - г) `langevin`
14. Какой параметр мы **НЕ** можем изменять в процессе моделирования методом МД? (ИПК 3.1):
- а) Температуру
 - б) Давление
 - в) Объём
 - г) Число атомов
 - д) Энергия межатомного взаимодействия
15. Отметьте все парные потенциалы (ИПК 3.1):
- а) Потенциал Букингема
 - б) Потенциал Морзе

- в) Потенциал Терзоффа
 - г) Потенциал жёстких сфер
16. В основе теории функционала плотности лежит факт, что важнейшие свойства системы однозначно могут быть выражены через _____ (ИПК 3.1):
- а) Функционал электронной плотности
 - б) Корреляционные функции
 - в) Приближение невзаимодействующих электронов
 - г) Локальную аппроксимацию плотности
 - д) Обобщенное градиентное разложение
17. Что можно моделировать с применением парных потенциалов межатомного взаимодействия? (ИПК 3.1):
- а) Переходные металлы
 - б) Полупроводники
 - в) Инертные газы
 - г) Жидкости
18. Температура моделируемой системы пропорциональна (ИПК 3.1):
- а) Скорости частиц
 - б) Квадрату скорости частиц
 - в) Числу степеней свободы
 - г) Массе частиц
19. Для расчёта какой константы может использоваться моноклинное искажение решётки? (ИПК 3.1):
- а) Объёмный модуль упругости
 - б) Модуль Юнга
 - в) Модуль тетрагонального сдвига C'
 - г) Упругая константа C_{44}
20. Какие из действий выполняются в процессе моделирования один раз? (ИПК 3.1):
- а) Расчёт сил, действующих на частицы
 - б) Интегрирование уравнений движения
 - в) Инициализация системы
 - г) Расчёт средних значений величин

Ключи: 1 а)-2), б)-3), в)-4), г)-1); 2 а)-2), б)-3), в)-1); 3 б); 4 г); 5 а), в); 6 а), в), д); 7 г); 8 в), г); 9 г); 10 б); 11 б), в); 12 в); 13 а), б), г); 14 г), д); 15 а), б), г); 16 а); 17 в), г); 18 б), г); 19 г); 20 в), г).

Задачи (ИПК 3.1, ИОПК 1.2)

Задача 1

Написать скрипт для проведения моделирования плавления кристалла никеля, содержащего 6000 атомов. Результаты расчёта должны выводиться в виде эволюции атомной структуры и табличных данных для построения графика температуры от времени.

Задача 2

Написать скрипт для проведения моделирования взаимодействия вакансий и межузельных атомов в кристалле циркония. Результаты расчёта должны выводиться в виде эволюции атомной структуры и табличных данных о количестве межузельных атомов и вакансий в кристалле.

Теоретические вопросы:

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям
2. Основы метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Ограничения метода.

3. Парные потенциалы. Достоинства и недостатки.
4. Многочастичные потенциалы. Потенциал Стиллинджена-Вебера.
5. Потенциалы для материалов с ковалентной связью. Потенциал Терзоффа
6. Алгоритм Верле. Метод чехарды. Метод Верле со скоростями
7. Термостат Берендсена. Термостат Андерсена. Термостат Нозе-Гувера. Достоинства и недостатки термостатов.
8. Баростат Берендсена. Баростат Андерсена. Достоинства и недостатки баростатов.
9. Расчёт внутренней энергии и температуры. Расчёт Давления.
10. Расчёт теплоёмкости. Определение энтропии. Определение свободной энергии
11. Радиальная функция распределения. Примеры графиков для материалов в различном агрегатном состоянии.
12. Расчёт диффузии. Среднеквадратичное смещение атомов. Автокорреляция скоростей.
13. Метод Монте-Карло. Организация моделирования.
14. Генераторы случайных чисел.
15. Примеры решения задач методом Монте-Карло. Определение площади круга. Вычисление интеграла. Задача о перколяции.
16. Выборка по значимости. Алгоритм Метрополиса.
17. Алгоритм метода Монте-Карло. Пробные шаги смещения.
18. Моделирование различных ансамблей методом Монте-Карло.
19. Функционал электронной плотности.
20. Теоремы Хоэнберга – Кона. Система уравнений Кона – Шэма.

Информация о разработчиках

Никонов Антон Юрьевич, кандидат физико-математических наук, кафедра физики металлов физического факультета ТГУ, доцент.