

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский университет «МЭИ»

Направление подготовки/специальность: 14.03.01 Ядерная энергетика и теплофизика

Наименование образовательной программы: Термоядерные реакторы и плазменные установки

Уровень образования: высшее образование - бакалавриат

Форма обучения: Очная

Рабочая программа дисциплины
ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ


| | |
|---|---|
| Блок: | Блок 1 «Дисциплины (модули)» |
| Часть образовательной программы: | Часть, формируемая участниками образовательных отношений |
| № дисциплины по учебному плану: | Б1.Ч.05 |
| Трудоемкость в зачетных единицах: | 6 семестр - 2; 7 семестр - 4; всего - 6 |
| Часов (всего) по учебному плану: | 216 часов |
| Лекции | 6 семестр - 14 часов; 7 семестр - 16 часов; всего - 30 часов |
| Практические занятия | 6 семестр - 28 часа; 7 семестр - 48 часа; всего - 76 часа |
| Лабораторные работы | не предусмотрено учебным планом |
| Консультации | проводится в рамках часов аудиторных занятий |
| Самостоятельная работа | 6 семестр - 29,7 часа; 7 семестр - 79,7 часа; всего - 109,4 часов |
| в том числе на КП/КР | не предусмотрено учебным планом |
| Иная контактная работа | проводится в рамках часов аудиторных занятий |
| включая: Коллоквиум Контрольная работа Тестирование Программирование (код) | |
| Промежуточная аттестация: | |
| Зачет с оценкой | 6 семестр - 0,3 часа; |
| Зачет с оценкой | 7 семестр - 0,3 часа; всего - 0,6 часа |

Москва 2023

ПРОГРАММУ СОСТАВИЛ:

Преподаватель

(должность)

| | | |
|---|--|--------------------------------|
|  | Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» | |
| | Сведения о владельце ЦЭП МЭИ | |
| | Владелец | Лубенченко А.В. |
| | Идентификатор | R4e612482-LubenchenkoAV-ecf64b |

(подпись)


А.В. Лубенченко

(расшифровка подписи)

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель
образовательной программы

(должность, ученая степень, ученое звание)

| | | |
|---|--|----------------------------|
|  | Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» | |
| | Сведения о владельце ЦЭП МЭИ | |
| | Владелец | Дедов А.В. |
| | Идентификатор | R72c90f41-DedovAV-d71cc7f4 |


(подпись)

А.В. Дедов

(расшифровка
подписи)

Заведующий выпускающей
кафедры

(должность, ученая степень, ученое звание)

| | | |
|---|--|----------------------------|
|  | Подписано электронной подписью ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» | |
| | Сведения о владельце ЦЭП МЭИ | |
| | Владелец | Дедов А.В. |
| | Идентификатор | R72c90f41-DedovAV-d71cc7f4 |

(подпись)

А.В. Дедов

(расшифровка
подписи)

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины: изучение методов имитационного моделирования для последующего использования в ядерной энергетике и физике плазмы

Задачи дисциплины

- ознакомление с основными понятиями и методами имитационного моделирования систем в ядерной энергетике и физике плазмы;
- приобретение навыков практического решения задач методами молекулярной динамики и монте-карловского моделирования;
- обучение использованию математического пакета MATLAB для решения задач физики плазмы;
- обучение программированию и отладке программ в системе MATLAB.

Формируемые у обучающегося **компетенции** и запланированные **результаты обучения** по дисциплине, соотнесенные с **индикаторами достижения компетенций**:

| Код и наименование компетенции | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Запланированные результаты обучения |
|---|--|--|
| ПК-3 Способен к участию в лабораторном и численном эксперименте, обработке опытных данных | ИД-1 _{ПК-3} Владеет основными понятиями и методами имитационного моделирования процессов в плазме и воздействия плазмы на материалы | знать: - математические основы, понятия, закономерности метода Монте-Карло; - математические основы, понятия, закономерности метода молекулярной динамики; - возможности математического пакета MATLAB для решения задач ядерной энергетике и физики плазмы; - объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB. уметь: - выполнять компьютерный эксперимент с помощью программ имитационного моделирования и проводить обработку и анализ результатов компьютерного эксперимента; - разрабатывать алгоритмы, основанные на методах Монте-Карло; - разрабатывать алгоритмы, основанные на методах молекулярной динамики; - создавать и отлаживать программы имитационного моделирования используя систему MATLAB. |

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ ВО

Дисциплина относится к основной профессиональной образовательной программе Термоядерные реакторы и плазменные установки (далее – ОПОП), направления подготовки 14.03.01 Ядерная энергетика и теплофизика, уровень образования: высшее образование - бакалавриат.

Базируется на уровне среднего общего образования.

Результаты обучения, полученные при освоении дисциплины, необходимы при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

| № п/п | Разделы/темы дисциплины/формы промежуточной аттестации | Всего часов на раздел | Семестр | Распределение трудоемкости раздела (в часах) по видам учебной работы | | | | | | | | | | Содержание самостоятельной работы/ методические указания | |
|-------|--|-----------------------|---------|--|-----|----|--------------|---|-----|----|----|-------------------|-----------------------------------|---|---|
| | | | | Контактная работа | | | | | | | СР | | | | |
| | | | | Лек | Лаб | Пр | Консультация | | ИКР | | ПА | Работа в семестре | Подготовка к аттестации /контроль | | |
| КПР | ГК | ИККП | ТК | | | | | | | | | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | |
| 1 | MatLab: основы и применение | 22 | 6 | 6 | - | 12 | - | - | - | - | - | 4 | - | <p><u>Самостоятельное изучение теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу "MatLab: основы и применение"</p> <p><u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "MatLab: основы и применение" материалу. Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам.</p> <p><u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу "MatLab: основы и применение"</p> <p><u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу "MatLab: основы и применение" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях</p> <p><u>Изучение материалов литературных источников:</u> [6], 5-252</p> | |
| 1.1 | Система MatLab | 3 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | - | - | | - |
| 1.2 | Программирование в MatLab | 6 | | 2 | - | 3 | - | - | - | - | - | - | 1 | | - |
| 1.3 | Решение практических задач в системе MatLab | 5 | | 1 | - | 3 | - | - | - | - | - | - | 1 | | - |
| 1.4 | Построение графиков в системе MatLab | 4 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | - | 1 | | - |
| 1.5 | Инструментарий MatLab | 4 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | - | 1 | | - |
| 2 | Имитационное моделирование | 14 | | 4 | - | 6 | - | - | - | - | - | 4 | - | <p><u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу</p> | |

| | | | | | | | | | | | | | |
|-----|--|----|---|---|----|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 2.1 | Имитационное моделирование физических процессов | 4 | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 1 | - | "Имитационное моделирование" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях |
| 2.2 | Детерминистические методы | 4 | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 1 | - | <u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу |
| 2.3 | Стохастические методы | 4 | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 1 | - | "Имитационное моделирование" |
| 2.4 | Программы имитационного моделирования | 2 | 1 | - | - | - | - | - | - | - | 1 | - | <u>Самостоятельное изучение теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу "Имитационное моделирование" <u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "Имитационное моделирование" материалу. Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам. |
| 3 | Молекулярная динамика | 18 | 4 | - | 10 | - | - | - | - | - | 4 | - | <u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу |
| 3.1 | Численное моделирование методом частиц | 4 | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 1 | - | "Молекулярная динамика" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях |
| 3.2 | Схемы интегрирования по времени уравнений Ньютона | 5 | 1 | - | 3 | - | - | - | - | - | 1 | - | <u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу "Молекулярная динамика" <u>Самостоятельное изучение теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу |
| 3.3 | Начальные и граничные условия | 4 | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 1 | - | "Молекулярная динамика" |
| 3.4 | Определение макро- и микроскопических характеристик среды на основе расчета траекторий частиц. | 5 | 1 | - | 3 | - | - | - | - | - | 1 | - | <u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "Молекулярная динамика" материалу. |

| | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|--|------|---|----|---|----|---|---|---|---|-----|------|--|--|
| | | | | | | | | | | | | | Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам. <u>Подготовка доклада, выступления:</u> Задание связано с углубленным изучением разделов дисциплины и самостоятельным поиском материалов для раскрытия темы доклада. Материалы выполненной работы представляются в электронном виде или в форме распечатанных презентационных слайдов. В качестве тем докладов студентам предлагаются следующие варианты: <u>Изучение материалов литературных источников:</u> [4], 5-156 | |
| | Зачет с оценкой | 18.0 | | - | - | - | - | - | - | - | 0.3 | - | 17.7 | |
| | Всего за семестр | 72.0 | | 14 | - | 28 | - | - | - | - | 0.3 | 12 | 17.7 | |
| | Итого за семестр | 72.0 | | 14 | - | 28 | - | - | - | - | 0.3 | 29.7 | | |
| 4 | Метод Монте-Карло | 25 | 7 | 5 | - | 10 | - | - | - | - | - | 10 | - | <u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу "Метод Монте-Карло" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях |
| 4.1 | Математические основы метода Монте-Карло | 5 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 2 | - | |
| 4.2 | Генераторы случайных чисел | 5 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 2 | - | <u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу "Метод Монте-Карло" |
| 4.3 | Моделирование непрерывных случайных величин | 5 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 2 | - | <u>Самостоятельное изучение теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу "Метод Монте-Карло" |
| 4.4 | Расчёт интегралов методом Монте-Карло | 5 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 2 | - | |
| 4.5 | Монте-Карловское моделирование рассеяния частиц в веществе | 5 | | 1 | - | 2 | - | - | - | - | - | 2 | - | <u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "Метод Монте-Карло" материалу. Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры |

| | | | | | | | | | | | | | |
|-----|--|----|---|---|----|---|---|---|---|---|----|---|--|
| | | | | | | | | | | | | | выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам. <u>Изучение материалов литературных источников:</u> [3], 4-100 [5], 20-120 |
| 5 | Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей | 52 | 6 | - | 22 | - | - | - | - | - | 24 | - | <u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу "Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях |
| 5.1 | Объектно-ориентированное программирование в системе MatLab | 13 | 1 | - | 6 | - | - | - | - | - | 6 | - | <u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу "Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей" |
| 5.2 | Создание графического интерфейса пользователя (GUI) в системе MatLab | 12 | 1 | - | 5 | - | - | - | - | - | 6 | - | <u>Самостоятельное изучение теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу "Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей" |
| 5.3 | Объектно-ориентированное программирование: молекулярная динамика | 13 | 2 | - | 5 | - | - | - | - | - | 6 | - | <u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей" материалу. Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам. |
| 5.4 | Объектно-ориентированное программирование: метод Монте-Карло | 14 | 2 | - | 6 | - | - | - | - | - | 6 | - | <u>Изучение материалов литературных источников:</u> [1], 126-230 |
| 6 | Компьютерный эксперимент | 49 | 5 | - | 16 | - | - | - | - | - | 28 | - | <u>Подготовка домашнего задания:</u> Подготовка домашнего задания направлена |

| | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|--|-------|---|----|---|----|---|---|---|---|-----|-------|------|--|
| 6.1 | Молекулярно динамическое моделирование заряженных частиц в осесимметричной ловушке | 11 | | 1 | - | 4 | - | - | - | - | - | 6 | - | на отработку умений решения профессиональных задач. Домашнее задание выдается студентам по изученному в разделе "Компьютерный эксперимент" материалу. Дополнительно студенту необходимо изучить литературу и разобрать примеры выполнения подобных заданий. Проверка домашнего задания проводится по представленным письменным работам. |
| 6.2 | Молекулярно динамическое моделирование одномерной плазмы | 11 | | 1 | - | 4 | - | - | - | - | - | 6 | - | <u>Самостоятельное изучение</u> |
| 6.3 | Сто миллионов траекторий МК | 13 | | 1 | - | 4 | - | - | - | - | - | 8 | - | <u>теоретического материала:</u> Изучение дополнительного материала по разделу "Компьютерный эксперимент" |
| 6.4 | Отражение электронов от двухслойная оксид-металлическая мишени с неровной поверхностью | 14 | | 2 | - | 4 | - | - | - | - | - | 8 | - | <u>Подготовка расчетных заданий:</u> Задания ориентированы на решения минизаданий по разделу "Компьютерный эксперимент". Студенты необходимо повторить теоретический материал, разобрать примеры решения аналогичных задач. провести расчеты по варианту задания и сделать выводы. <u>Подготовка к практическим занятиям:</u> Изучение материала по разделу "Компьютерный эксперимент" подготовка к выполнению заданий на практических занятиях <u>Подготовка к текущему контролю:</u> Повторение материала по разделу "Компьютерный эксперимент" <u>Изучение материалов литературных источников:</u> |
| | Зачет с оценкой | 18.0 | | - | - | - | - | - | - | - | 0.3 | - | 17.7 | [2], 126-300 |
| | Всего за семестр | 144.0 | | 16 | - | 48 | - | - | - | - | 0.3 | 62 | 17.7 | |
| | Итого за семестр | 144.0 | | 16 | - | 48 | - | - | - | - | 0.3 | 79.7 | | |
| | ИТОГО | 216.0 | - | 30 | - | 76 | - | - | - | - | 0.6 | 109.4 | | |

Примечание: Лек – лекции; Лаб – лабораторные работы; Пр – практические занятия; КПП – аудиторные консультации по курсовым проектам/работам; ИККП – индивидуальные консультации по курсовым проектам/работам; ГК- групповые консультации по разделам

дисциплины; СР – самостоятельная работа студента; ИКР – иная контактная работа; ТК – текущий контроль; ПА – промежуточная аттестация

3.2 Краткое содержание разделов

1. MatLab: основы и применение

1.1. Система MatLab

Интерфейс MatLab. Система помощи в MatLab. Рабочие окна: командное окно, область данных, текущая папка. Режим командной строки. Набор команд, Основные операции в MatLab. Сценарии и функции. Документирование функций.

1.2. Программирование в MatLab

Типы данных MatLab. Массивы. Индексация массивов. Операторы условного перехода. Циклы. Векторизация циклов в MatLab. m-сценарии и m-функции. Редактирование и отладка программ.

1.3. Решение практических задач в системе MatLab

Задачи линейной алгебры. Решение нелинейных уравнений и систем уравнений. Нахождение экстремумов функции, интерполяция и регрессия. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений.

1.4. Построение графиков в системе MatLab

Графические объекты MatLab. Построение 2D-графиков. Построение 3D-графиков. Специальная графика.

1.5. Инструментарий MatLab

Инструменты MatLab. Symbolic Math Toolbox. Curve Fitting Toolbox. Partial Differential Equation Toolbox.

2. Имитационное моделирование

2.1. Имитационное моделирование физических процессов

Основные составляющие процесса моделирования. Физическая модель. Математическая модель. Компьютерная модель. Особенности имитационного моделирования.

2.2. Детерминистические методы

Задача N-тел. Система уравнений Ньютона. Построение траекторий тел исходя из внутренних законов системы. Молекулярная динамика. Ограничения метода Молекулярной динамики.

2.3. Стохастические методы

Задача N-тел. Кинетические уравнения. Построение траекторий тел исходя из вероятностей рассеяния. Метод Монте-Карло. Ограничения метода Монте-Карло.

2.4. Программы имитационного моделирования

Пакеты молекулярной динамики Gromacs, NAMD, LAMMPS. Программы МК-моделирования электронного рассеяния: CASINO, EGSnrc, Geant4, MCNP5 и Penelope. Программы МК-моделирования ионного рассеяния и распыления: TRIM, TRIM-SP.

3. Молекулярная динамика

3.1. Численное моделирование методом частиц

Вычислительные модели частиц. Модель частица-частица. Модель частица-сетка. Модель частица-частица — частица-сетка.

3.2. Схемы интегрирования по времени уравнений Ньютона

Схема с перешагиванием. Схема Верле. Скоростная модификация Верле. Схеме Рунге-Кутты второго и четвертого порядка.

3.3. Начальные и граничные условия

Начальные условия для координат и скоростей. Системы с постоянным числом частиц. Периодические граничные условия. Системы с постоянной температурой стенки. Системы, находящейся под постоянным давлением.

3.4. Определение макро- и микроскопических характеристик среды на основе расчета траекторий частиц.

Обезразмеривание уравнения Ньютона. Расчет кинетической и потенциальной энергий системы. Теплоемкость системы. Коэффициент самодиффузии.

4. Метод Монте-Карло

4.1. Математические основы метода Монте-Карло

Основные понятия теории вероятности. Предельные теоремы теории вероятности. Математическая статистика.

4.2. Генераторы случайных чисел

Алгоритмические генераторы случайных чисел. Линейные конгруэнтные генераторы. Вихрь Мерсенна (Mersenne twister). Функция rand MatLab.

4.3. Моделирование непрерывных случайных величин

Метод Неймана (метод отбора). Метод суперпозиций. Метод обратных функций.

4.4. Расчёт интегралов методом Монте-Карло

Интегрирование функций ограниченных на интервале. Метод "стрельбы". Метод интегрирования на основе математического ожидания.

4.5. Монте-Карловское моделирование рассеяния частиц в веществе

Физическая модель взаимодействия частиц с веществом. МК моделирование упругого рассеяния частиц. МК моделирование упругого и неупругого рассеяния частиц. Моделирование рассеяния частиц в неоднородных средах. Статистическая обработка результатов моделирования. Весовые методы. Локальная оценка.

5. Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей

5.1. Объектно-ориентированное программирование в системе MatLab

Определение классов и использование их атрибутов. Классы, свойства, методы. Типы классов. Value- и Handle-классы. События и реагирование на события. Объекты-контейнеры. Принципы и практика создания иерархии классов. Инструменты разработки программного обеспечения.

5.2. Создание графического интерфейса пользователя (GUI) в системе MatLab

Графические объекты MATLAB. Иерархия графического объекта. Разработка классов графика. Идентификация графического объекта. Интерактивное управление и обратные вызовы. Разработка приложений GUI с использованием графических объектов MATLAB. Разработка приложений GUI в App Designer. Создание веб-приложений.

5.3. Объектно-ориентированное программирование: молекулярная динамика

Проектирование объектов молекулярной динамики. Класс "частица". Класс "траектория". Класс "микроскопические характеристики". Класс "макроскопические характеристики". Разработка приложения GUI молекулярной динамики.

5.4. Объектно-ориентированное программирование: метод Монте-Карло

Проектирование объектов метода Монте-Карло. Класс "источник". Класс "материал". Класс "траектория". Класс "статистическая обработка". Разработка приложения GUI метода Монте-Карло.

6. Компьютерный эксперимент

6.1. Молекулярно динамическое моделирование заряженных частиц в осесимметричной ловушке

Физическая и математическая модель заряженных частиц в осесимметричной ловушке. Построение дискретной модели: уравнение движение, внешние потенциальные поля. Численные алгоритмы: безразмерные единицы, выбор схемы интегрирования, проблема выбора шага по времени. Вычислительные эксперименты: кинетическая и потенциальная энергии, кулоновские кристаллы.

6.2. Молекулярно динамическое моделирование одномерной плазмы

Физическая и математическая модель одномерной плазмы. Построение дискретной модели: уравнение движение, уравнение полей, раздача заряда и интерполяция силы. Численные алгоритмы: безразмерные единицы, раздача заряда, уравнение Пуассона. Вычислительные эксперименты: двухчастичный тест, дисперсия волн, холодная плазма, двухпоточковая неустойчивость.

6.3. Сто миллионов траекторий МК

Оценка времени и точности расчета по программе МК моделирования. Эффективность алгоритмов МК. Повышение эффективности программы МК моделирования. Метод банка случайных чисел. Матричный метод МК.

6.4. Отражение электронов от двухслойная оксид-металлическая мишени с неровной поверхностью

Физическая и математическая модель отражение электронов от двухслойной мишени. Построение дискретной модели: построение стохастической траектории частицы в двухслойной мишени. Численные алгоритмы: построение стохастической траектории частицы, статистическая обработка. Вычислительные эксперименты: двухслойная оксид-металлическая мишени, двухслойная мишень со стохастической поверхностью.

3.3. Темы практических занятий

1. Контрольная работа 3. Моделирование траекторий движения частиц методом Монте-Карло в системе MATLAB. (2 часа);
2. Потенциалы рассеяния и сечения рассеяния ионов в твердом теле. (2 часа);
3. . Вычислительные методы в физике. Физическая модель, математическая модель,

- компьютерная модель. (4 часа);
4. Контрольная работа №2 «Моделирование методом молекулярной динамики траекторий движения частиц». (4 часа);
 5. Одномерная модель плазмы. (2 часа);
 6. Моделирование методом молекулярной динамики траекторий движения частиц. Тест 2 «Молекулярная динамика». (4 часа);
 7. Схемы интегрирования по времени уравнений Ньютона. Согласованность и точность разностной аппроксимации. Устойчивость и эффективность разностной схемы. Выбор временного шага.(2 часа);
 8. Контрольная работа №1 «Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений». (2 часа);
 9. Интегрирование и дифференцирование в системе MATLAB.(2 часа);
 10. Решение задач линейной алгебры в системе MATLAB. (2 часа);
 11. Построение 2D- и 3D-графиков. Тест 1 «Система MATLAB» (2 часа);
 12. Программирование: написание сценариев, написание функций. Использование отладчика. (2 час);
 13. Работа с арифметическими операторами, математическими функциями. Встроенные и собственные функции. Базовые операции над массивами. (2 часа);
 14. Основы молекулярной динамики. Численное моделирование методом частиц. (2 часа);
 15. Моделирование рассеяния электронов в твердом теле методом МК. (2 часа);
 16. Весовые методы. Локальная оценка метода МК. (2 часа);
 17. Методы ускорения МК моделирования. Параллельные вычисления. (2 часа);
 18. Статистическая обработка в методе МК. Тест 4 «Метод Монте-Карло». (2 часа);
 19. Построение стохастической траектории движение частицы.(2 часа);
 20. Метод Монте-Карло (МК). Расчёт интегралов методом МК. Метод обратных функций. (2 часа);
 21. Контрольная работа №3 «Решение уравнений и минимизация в системе MATLAB». (2 часа);
 22. Решение задачи регрессии с помощью Curve Fitting (CF) Toolbox (2 часа);
 23. Решение уравнений математической физики с помощью PartialDifferentialEquations (PDE) Toolbox. (2 часа);
 24. Toolbox в системе MATLAB. (2 часа);
 25. Создание интерфейса в системе MATLAB. GUI-интерфейс. (4 часа);
 26. Объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB: Принципы и практика создания иерархии классов. Тест 3 «Объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB». (4 часа);
 27. Объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB: Value- и Handle-классы. События и реагирование на события. (2 часа);
 28. Объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB: Определение классов и использование их атрибутов. Классы, свойства, методы. Типы классов. (2 часа);
 29. Моделирование рассеяния ионов в твердом теле методом МК. (4 часа);
 30. Защита расчетного задания. (2 часа);
 31. Сечения рассеяния электронов в твердом теле. (2 часа);
 32. Интерфейс и возможности системы MATLAB. Настройка рабочей среды. Основные объекты и команды. (2 часа).

3.4. Темы лабораторных работ не предусмотрено

3.5 Консультации

3.6 Тематика курсовых проектов/курсовых работ

Курсовой проект/ работа не предусмотрены

3.7. Соответствие разделов дисциплины и формируемых в них компетенций

| Запланированные результаты обучения по дисциплине (в соответствии с разделом 1) | Коды индикаторов | Номер раздела дисциплины (в соответствии с п.3.1) | | | | | | Оценочное средство (тип и наименование) |
|---|------------------|---|---|---|---|---|---|--|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | |
| Знать: | | | | | | | | |
| объектно-ориентированное программирование в системе MATLAB | ИД-1пк-3 | | | | | + | | Тестирование/Программирование в системе MATLAB |
| возможности математического пакета MATLAB для решения задач ядерной энергетики и физики плазмы | ИД-1пк-3 | + | | | | | | Контрольная работа/Решение обыкновенных дифференциальных уравнений в MatLab Коллоквиум/Система компьютерной математики MATLAB |
| математические основы, понятия, закономерности метода молекулярной динамики | ИД-1пк-3 | | + | | | | | Тестирование/Имитационное моделирование физических процессов |
| математические основы, понятия, закономерности метода Монте-Карло | ИД-1пк-3 | | | | + | | | Тестирование/Метод Монте-Карло |
| Уметь: | | | | | | | | |
| создавать и отлаживать программы имитационного моделирования используя систему MATLAB | ИД-1пк-3 | | | | | + | | Программирование (код)/Защита расчетного задания |
| разрабатывать алгоритмы, основанные на методах молекулярной динамики | ИД-1пк-3 | | | + | | | | Контрольная работа/Моделирование траекторий движения частиц методом молекулярной динамики в системе MATLAB |
| разрабатывать алгоритмы, основанные на методах Монте-Карло | ИД-1пк-3 | | | | + | | | Контрольная работа/Моделирование траекторий движения частиц методом Монте-Карло в системе MATLAB |
| выполнять компьютерный эксперимент с помощью программ имитационного моделирования и проводить обработку и анализ результатов компьютерного эксперимента | ИД-1пк-3 | | | | | | + | Программирование (код)/Защита расчетного задания |

4. КОМПЕТЕНТНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ)

4.1. Текущий контроль успеваемости

6 семестр

Форма реализации: Билеты (письменный опрос)

1. Система компьютерной математики MATLAB (Коллоквиум)

Форма реализации: Компьютерное задание

1. Имитационное моделирование физических процессов (Тестирование)
2. Моделирование траекторий движения частиц методом молекулярной динамики в системе MATLAB (Контрольная работа)
3. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений в MatLab (Контрольная работа)

7 семестр

Форма реализации: Компьютерное задание

1. Защита расчетного задания (Программирование (код))
2. Метод Монте-Карло (Тестирование)
3. Моделирование траекторий движения частиц методом Монте-Карло в системе MATLAB (Контрольная работа)
4. Программирование в системе MATLAB (Тестирование)

Балльно-рейтинговая структура дисциплины является приложением А.

4.2 Промежуточная аттестация по дисциплине

Зачет с оценкой (Семестр №6)

Оценка определяется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе для студентов НИУ «МЭИ» на основании семестровой и аттестационной составляющих.

Зачет с оценкой (Семестр №7)

Оценка определяется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе для студентов НИУ «МЭИ» на основании семестровой и аттестационной составляющих.

В диплом выставляется оценка за 7 семестр.

Примечание: Оценочные материалы по дисциплине приведены в фонде оценочных материалов ОПОП.

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1 Печатные и электронные издания:

1. Потемкин, В. Г. Введение в MATLAB / В. Г. Потемкин . – М. : Диалог-МИФИ, 2000 . – 247 с. - ISBN 5-86404-140-8 : 39.50 .;
2. Аккерман, А. Ф. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе / А. Ф. Аккерман, Ю. М. Никитушев, В. А. Ботвин, АН Казахской ССР. Институт физики высоких энергий . – : Наука, 1972 . – 163 с.;
3. Соболев, И. М. Численные методы Монте-Карло / И. М. Соболев . – М. : Наука, 1973 . – 312 с.;

4. Метод молекулярной динамики в физической химии / Науч.-исслед. физико-химический ин-т им. Л.Я. Карпова Рос. акад. наук . – М. : Наука, 1996 . – 334 с. - ISBN 5-02-001907-0 : 20000.00 .;
5. Н. М. Соболевский- "Метод Монте-Карло в задачах о взаимодействии частиц с веществом", Издательство: "Физматлит", Москва, 2017 - (204 с.)
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485499>;
6. Амос Г.- "MATLAB. Теория и практика", (5-е изд.), Издательство: "ДМК Пресс", Москва, 2016 - (416 с.)
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=82814.

5.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

1. СДО "Прометей";
2. Office / Российский пакет офисных программ;
3. Windows / Операционная система семейства Linux;
4. Майнд Видеоконференции;
5. Python.

5.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

1. ЭБС Лань - <https://e.lanbook.com/>
2. ЭБС "Университетская библиотека онлайн" - http://biblioclub.ru/index.php?page=main_ub_red
3. Научная электронная библиотека - <https://elibrary.ru/>
4. База данных ВИНТИ online - <http://www.viniti.ru/>
5. База данных журналов издательства Elsevier - <https://www.sciencedirect.com/>
6. Электронные ресурсы издательства Springer - <https://link.springer.com/>
7. База данных Web of Science - <http://webofscience.com/>
8. База данных Scopus - <http://www.scopus.com>
9. Национальная электронная библиотека - <https://rusneb.ru/>
10. Журналы American Physical Society - <https://journals.aps.org/about>
11. Журналы издательства Cambridge University Press - <https://www.cambridge.org/core>
12. Электронная библиотека МЭИ (ЭБ МЭИ) - <http://elib.mpei.ru/login.php>
13. Портал открытых данных Российской Федерации - <https://data.gov.ru>

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

| Тип помещения | Номер аудитории, наименование | Оснащение |
|---|--------------------------------------|---|
| Учебные аудитории для проведения лекционных занятий и текущего контроля | А-110, Вычислительная лаборатория | стол преподавателя, стол компьютерный, стул, доска интерактивная, компьютерная сеть с выходом в Интернет, мультимедийный проектор, указка лазерная, многофункциональный центр, сервер, компьютер персональный, принтер, наборы демонстрационного оборудования |
| Учебные аудитории для проведения практических занятий, КР и КП | А-110, Вычислительная лаборатория | стол преподавателя, стол компьютерный, стул, доска интерактивная, компьютерная сеть с выходом в Интернет, мультимедийный проектор, указка лазерная, многофункциональный центр, сервер, компьютер персональный, принтер, наборы демонстрационного оборудования |

| | | |
|---|--|---|
| Учебные аудитории для проведения промежуточной аттестации | А-110, Вычислительная лаборатория | стол преподавателя, стол компьютерный, стул, доска интерактивная, компьютерная сеть с выходом в Интернет, мультимедийный проектор, указка лазерная, многофункциональный центр, сервер, компьютер персональный, принтер, наборы демонстрационного оборудования |
| Помещения для самостоятельной работы | А-110, Вычислительная лаборатория | стол преподавателя, стол компьютерный, стул, доска интерактивная, компьютерная сеть с выходом в Интернет, мультимедийный проектор, указка лазерная, многофункциональный центр, сервер, компьютер персональный, принтер, наборы демонстрационного оборудования |
| Помещения для консультирования | А-208, Преподавательская | кресло рабочее, рабочее место сотрудника, стол, шкаф для документов, компьютерная сеть с выходом в Интернет, колонки, компьютер персональный, принтер |
| Помещения для хранения оборудования и учебного инвентаря | А-025, Кладовка лабораторного оборудования | стеллаж, оборудование специализированное |

БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Имитационное моделирование плазменных процессов

(название дисциплины)

6 семестр

Перечень контрольных мероприятий текущего контроля успеваемости по дисциплине:

- КМ-1 Система компьютерной математики MATLAB (Коллоквиум)
- КМ-2 Решение обыкновенных дифференциальных уравнений в MatLab (Контрольная работа)
- КМ-3 Имитационное моделирование физических процессов (Тестирование)
- КМ-4 Моделирование траекторий движения частиц методом молекулярной динамики в системе MATLAB (Контрольная работа)

Вид промежуточной аттестации – Зачет с оценкой.

| Номер раздела | Раздел дисциплины | Индекс КМ: | КМ-1 | КМ-2 | КМ-3 | КМ-4 |
|---------------|---|------------|------|------|------|------|
| | | Неделя КМ: | 4 | 8 | 12 | 16 |
| 1 | MatLab: основы и применение | | | | | |
| 1.1 | Система MatLab | | + | + | | |
| 1.2 | Программирование в MatLab | | + | + | | |
| 1.3 | Решение практических задач в системе MatLab | | + | + | | |
| 1.4 | Построение графиков в системе MatLab | | + | + | | |
| 1.5 | Инструментарий MatLab | | + | + | | |
| 2 | Имитационное моделирование | | | | | |
| 2.1 | Имитационное моделирование физических процессов | | | | + | |
| 2.2 | Детерминистические методы | | | | + | |
| 2.3 | Стохастические методы | | | | + | |
| 2.4 | Программы имитационного моделирования | | | | + | |
| 3 | Молекулярная динамика | | | | | |
| 3.1 | Численное моделирование методом частиц | | | | | + |
| 3.2 | Схемы интегрирования по времени уравнений Ньютона | | | | | + |

| | | | | | |
|------------|--|----|----|----|----|
| 3.3 | Начальные и граничные условия | | | | + |
| 3.4 | Определение макро- и микроскопических характеристик среды на основе расчета траекторий частиц. | | | | + |
| Вес КМ, %: | | 15 | 30 | 20 | 35 |

7 семестр

Перечень контрольных мероприятий текущего контроля успеваемости по дисциплине:

- КМ-1 Моделирование траекторий движения частиц методом Монте-Карло в системе MATLAB (Контрольная работа)
- КМ-2 Программирование в системе MATLAB (Тестирование)
- КМ-3 Метод Монте-Карло (Тестирование)
- КМ-4 Защита расчетного задания (Программирование (код))

Вид промежуточной аттестации – Зачет с оценкой.

| Номер раздела | Раздел дисциплины | Индекс КМ: | КМ-1 | КМ-2 | КМ-3 | КМ-4 |
|---------------|--|------------|------|------|------|------|
| | | Неделя КМ: | 4 | 8 | 12 | 16 |
| 1 | Метод Монте-Карло | | | | | |
| 1.1 | Математические основы метода Монте-Карло | | + | | + | |
| 1.2 | Генераторы случайных чисел | | + | | + | |
| 1.3 | Моделирование непрерывных случайных величин | | + | | + | |
| 1.4 | Расчёт интегралов методом Монте-Карло | | + | | + | |
| 1.5 | Монте-Карловское моделирование рассеяния частиц в веществе | | + | | + | |
| 2 | Объектно-ориентированное программирование имитационных моделей | | | | | |
| 2.1 | Объектно-ориентированное программирование в системе MatLab | | | + | | |
| 2.2 | Создание графического интерфейса пользователя (GUI) в системе MatLab | | | + | | |
| 2.3 | Объектно-ориентированное программирование: молекулярная динамика | | | | | + |
| 2.4 | Объектно-ориентированное программирование: метод Монте-Карло | | | | | + |
| 3 | Компьютерный эксперимент | | | | | |
| 3.1 | Молекулярно динамическое моделирование заряженных частиц в осесимметричной ловушке | | | | | + |
| 3.2 | Молекулярно динамическое моделирование одномерной плазмы | | | | | + |
| 3.3 | Сто миллионов траекторий МК | | | | | + |

| | | | | | |
|------------|--|----|----|----|----|
| 3.4 | Отражение электронов от двухслойная оксид-металлическая мишени с неровной поверхностью | | | | + |
| Вес КМ, %: | | 15 | 30 | 15 | 40 |