

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Суворов Антон Дмитриевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 13.06.2025 20:30:47
Уникальный программный ключ:
a39bdb15d680d5b0adb1ced0a15c1efb14747dc0

СКОЛКОВСКИЙ ИНСТИТУТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ (Сколтех)

Рабочая программа дисциплины	Основы многомасштабного моделирования: Кинетика
------------------------------	---

Преподаватель	Бриллиантов Николай Васильевич, профессор, доктор физико-математических наук
---------------	--

Аннотация

Описание курса

Курс посвящен фундаментальным принципам моделирования кинетических процессов на различных пространственно-временных масштабах. Вводятся базовые концепции вместе с теоретическими и численными методами, что иллюстрируется на решении ряда практических проблем. В начале курса описывается молекулярная кинетика в жидкостях, коллоидных и полимерных растворах; обсуждается применение для наномашин и нанороботики. Вводятся уравнения Ланжевена и Фоккера-Планка а также теоретические и численные методы их решения.

Далее рассматривается кинетическое уравнение Больцмана. Иллюстрируется применение фундаментальных теоретических и численных методов типа метода Грэда и Чэпмена-Энского, решеточного Больцмана и Прямого Вычисления Монте Карло. Приведен вывод транспортных коэффициентов. Рассматривается также альтернативный метод Грина-Кубо для практических вычислений. На основе уравнения Больцмана строится теория агрегационно-фрагментационной кинетики, которая отвечает обобщенному уравнению Смолуховского. Базовые концепции, такие как Скэйлинг, Производящие функции и т.д. вводятся для теоретического анализа; для численного моделирования приводится алгоритм Гиллеспе и быстрые солверы для решения практических задач. Далее в курсе иллюстрируется применение введенных методов для моделирования роста поверхностей, абсорбции, кинетики фазовых переходов, нуклеации и нанотрибологии. Также рассматривается теория активной материи, модели трафика, социодинамики и сложных сетей.

Для курса необходимы знания в объеме математики первых курсов -- основы матанализа, линейная алгебра, теория вероятностей а также начальные знания программирования на MATLABe или Pythone. Желательно также знакомство с основными открытыми программами.

1. Основная информация

Академический уровень курса	Магистратура Аспирантура
-----------------------------	-----------------------------

Количество кредитов	6
---------------------	---

Предварительные требования к курсу / рекомендации

Базовые курсы бакалавриата по ODE, PDE, классической механике, основам линейной алгебры, теории вероятностей. Знакомство с Python и Matlab.

Тип оценки - дифференцированная

Отображение оценок в процентах

A:	86
B:	76
C:	66
D:	56
E:	46
F:	0

2. Содержание курса

Тема	Краткое содержание	Лекции (час)	Семинары (час)	Лабораторные занятия (час)
1. Молекулярная Кинетика, броуновская Динамика и наномеханика	Молекулярные корреляционные функции во времени и спектральные методы - основные области применения. Уравнения Ланжевена и Фоккера-Планка. Аналитические и вычислительные подходы. Броуновское движение; динамика макромолекул. Молекулярные машины, двигатели и элементы нанороботики. Химико-механический анализ на наноуровне. Молекулярная динамика (МД) в сравнении с броуновской динамикой (BD). Среднее время первого прохождения (MFPT). Кинетическая теория реакций. Кинетика в системах с молекулярно-химическим обменом. Численные методы моделирования кинетики реакций. Методы Монте-Карло и алгоритмы Гиллеспи для моделирования кинетики реакций.	9	9	3
2. Моделирование транспорта	Теория микроскопического переноса. Уравнение Больцмана (BE) и	9	9	3

ных процессов	уравнение Энскога (EE). Уравнение Фоккера-Планка в крупнозернистом виде VE/EE. Гранулированные жидкости и быстрые потоки гранулированных материалов; VE/EE для гранулированных газов. Методы расчета коэффициентов переноса из VE/EE; метод Чепмена-Энскога и метод Града. Вывод уравнения гидродинамики из VE/EE. Молекулярная динамика (MD), решеточные автоматы, решетки Больцмана (LB) и прямое моделирование методом Монте-Карло (DSMC) методы. Методы расчета транспортных коэффициентов Грина-Кубо в сравнении с методами Чепмена-Эскога – преимущества и недостатки обоих методов. Аномальный перенос (аномальная диффузия). Фрактальные кинетические уравнения. Проблемы эргодичности, скученность, полеты Леви. Численный метод решения уравнений с фрактальными производными.			
3. Кинетика Многовидовых систем	Кинетика агрегации и фрагментации. Уравнения Смолуховского. Вывод уравнений Смолуховского из VE. Диффузия и баллистическая агрегация. Базовые модели коэффициентов скорости; бинарная и спонтанная фрагментация. Применение моделей AF в медицине. Гелеобразование. Масштабирование, генерирующие функции. Алгоритм Гиллеспи и основные идеи быстрого Решателя уравнений Смолуховского.	3	3	1
4. Многофазность и кинетика фазовых превращений	Адсорбция; случайная последовательная адсорбция (RSA), модели и методы моделирования RSA; проблемы с парковкой. Кинетика фазовых переходов, укрупнение. Консервативная и неконсервативная динамика. Зарождение и рост. Поверхностный рост; модели роста поверхности Эдвардса-Уилкинсона и KPZ. Диффузионные реакции и улавливание.	3	3	1
5. Многомасштабная трибология	Модели трения. Трибология и нанотрибология. Микроскопические модели трения твердого тела. Модели Кундалла-Страйка, Прандтля-Томлинсона и Френкеля-Конторовой-Томлинсона. Модели поперечных	2	1	1

	поверхностных фононов. Наноразрушения; нарушенная двумерная диффузия наночастиц .			
6. Активное вещество	Теория активного вещества. Модели Виксека и родственные им. Модели социальных сил. Моделирование динамики толпы. Модели дорожного движения; дискретные (основанные на агентах) и непрерывные (гидродинамические) модели. Модели социальной динамики. Модели голосования. Сложный Динамика сетей.	2	2	

3. Результаты обучения

Результаты обучения в Сколтехе указаны в соответствии со структурой результатов обучения в Сколтехе

Знания
Изучите современные численные и аналитические подходы к моделированию кинетических процессов в различных пространственных и временных масштабах. Поймите область применения и относительную эффективность различных вычислительных методов. Поймите физическую природу процессов и то, как эффективность численных алгоритмов зависит от физической природы явления. Изучите существующее программное обеспечение для кинетического моделирования и современную парадигму его применения в различных областях науки и техники.
Уметь разбираться в научных статьях в области кинетического моделирования в научных журналах, начиная от фундаментальных статей и заканчивая статьями, посвященными прикладным исследованиям. Понимать взаимосвязь кинетических моделей в разных пространственных и временных масштабах. Понимать, в чем заключаются методы машинного обучения. (ML) и искусственный интеллект (AI) могут быть использованы для повышения эффективности кинетического моделирования

Навыки
Сформулируйте математическую модель процесса для различных пространственных и временных масштабов. Выполните аналитические оценки для упрощенной/сокращенной модели, используя основные аналитические инструменты, изученные в курсе. Используйте существующее программное обеспечение для численного моделирования явлений; при необходимости напишите коды, соответствующие эффективным вычислительным алгоритмам. Освойте базовое программное обеспечение в различных приложениях.
Внедряйте, где это возможно, элементы искусственного интеллекта и МІ для повышения эффективности многомасштабного моделирования

Опыт
Анализ имеющегося программного обеспечения на предмет его соответствия моделированию конкретного явления. Внедрение имеющегося программного обеспечения для моделирования. Объединение имеющегося программного обеспечения для создания цифрового двойника процесса.

4. Задания и выставление оценок

Тип назначения	Краткое содержание задания	% от итоговой оценки за курс
----------------	----------------------------	------------------------------

Домашние задания	Молекулярная кинетика, броуновская динамика и наномеханика Моделирование процессов переноса Кинетика многокомпонентных и многофазных систем и кинетика фазовых превращений Диссипативные системы, трение и активные среды	40
Промежуточный экзамен		20
Финальный проект	Итоговый проект. Команды до 5 студентов решают открытый проект	40

5. Критерии оценки

<u>Задание 1 Типа</u>	Домашние задания
------------------------------	------------------

Пример задания 1

Задание будет состоять из смеси теоретических задач и задач по программированию, основанных на понятиях, изложенных в лекциях. Каждое задание будет содержать задачи различной сложности, оцениваемые в баллах; ценность каждой задачи в баллах будет четко указана.

Задача 1 посвящена молекулярной кинетике, броуновской динамике и; Наномеханика.

Пример задачи для задания 1:

Задача 1. Частицы в потенциале храповика как модель молекулярных двигателей (3 балла)

(а) Используя сопряженное уравнение Фоккера-Планка, найдите среднее время первого прохождения частицы, находящейся вблизи дна потенциальной ямы с асимметричным кусочно-линейным потенциалом (храповик) для перехода в левую и правую лунки.

(б) Напишите код для моделирования стохастического уравнения Ланжевена с избыточным коэффициентом усиления, описывающего движение частицы при том же потенциале храповика.

(в) Сравните аналитические и численные результаты.

(д) Напишите код для моделирования уравнения Ланжевена с цветным шумом и сравните результаты моделирования с результатами предыдущих пунктов.

(е) Обсудите применение в молекулярных двигателях.

Задача 2. Моделирование молекулярной кинетики: функции временной корреляции (3 балла).

- (a) Используя доступное программное обеспечение (LAMMPS, GROMAX), выполните математическое моделирование плотной жидкости Леннарда-Джонса при температурах, соответствующих жидкой фазе (найдите соответствующие параметры в литературе).
- (b) Вычислить автокорреляционную функцию скорости (VACF) частицы и автокорреляционную функцию силы
- (c) Вычислите VACF аналитически, используя обобщенное уравнение Ланжевена, применяя представление в виде непрерывной дроби (выберите порядок методов и используйте результаты, указанные в пункте (b)).
- (d) Сравните числовой и аналитический VACF. Прокомментируйте свои результаты. Как можно реализовать методы искусственного интеллекта (AI) и искусственного интеллекта (ML) для моделирования кинетики жидкости с использованием обобщенного уравнения Ланжевена? Внесите свои предложения.

Критерии оценки для задания 1

Оцениваются от 0 до 12. Правила подачи заявок с опозданием: скидка 15% за каждый день (или его часть) после истечения крайнего срока подачи заявок. По истечении трех дней баллы не начисляются. В случае возникновения проблем с оценкой (если студент считает, что оценка выставлена неверно), пожалуйста, отправьте запрос на повторную оценку не позднее, чем через неделю после того, как работа была возвращена с первоначальной оценкой. Запросы на повторную оценку следует направлять в письменной форме или по электронной почте любому сотруднику учебного персонала.

<u>Задание 2 Типа</u>	Домашние задания
------------------------------	------------------

Как и задание 1, задание 2 будет состоять из смеси теоретических задач и задач по программированию, основанных на понятиях, изложенных в лекциях. Каждое задание будет содержать задачи различной сложности, оцениваемые оценками; будет четко указано значение каждой задачи в виде оценок.

Задача 2 посвящена моделированию транспортных процессов.

Пример задачи для задачи 2:

Задача 2. Вычисление коэффициентов переноса (2 балла).

- (a) Используя доступное программное обеспечение для MD-моделирования (LAMMPS фирмы GROMAX), выполните моделирование жидкости Леннарда-Джонса с помощью MD-моделирования
- (b) Используя соотношения Грина-Кубо, вычислите вязкость системы при одинаковой плотности, но разных температурах
- (v) Постройте график зависимости вязкости от температуры. Согласуется ли это с законом активации? Если да, найдите энергию активации.
- (d) Можете ли вы предложить внедрение ML и AI в метод Грина-Кубо для облегчения расчета вязкости жидкости.

Задача 3. Моделирование аномальной диффузии (2 балла).

(а) Напишите код для моделирования одномерного и двумерного полета Леви с различным распределением длины прыжка.

(б) Вычислите показатели для зависимости среднеквадратичного смещения от времени.

(с) Для каких распределений длин скачков наблюдается сверхдиффузия? Почему? Дайте теоретическое обоснование своим выводам.

(d) Можете ли вы предложить уравнение с дробной производной, описывающее явление, которое вы моделируете?

Критерии оценки для задания 2

Оценено от 0 до 12. Правила поздней подачи и выставления повторных оценок, как в задании 1

<u>Задание 3 Типа</u>	Домашние задания
------------------------------	------------------

Структура задачи 3 такая же, как и у предыдущих задач. Задача 3 посвящена кинетике многокомпонентных и многофазных систем и кинетике фазовых превращений

Пример задачи к заданию 3:

Задача 2. Уравнения Смолуховского (2 балла).

Используя метод производящих функций, решите классические уравнения Смолуховского для ядер: (i) $K_{ij} = \text{const}$ и (ii) $K_{ij} = \left(ij \right)^\mu$, с $\mu < 0.5$.

Запишите код для решения системы ODE уравнения Смолуховского из пункта (а); позаботьтесь о сохранении массы.

Запишите код для поиска решения уравнения Смолуховского с использованием алгоритма Гиллеспи.

Обсудите способы реализации эффективных решателей. Какой класс ядер позволяет применять быстрые решатели уравнения Смолуховского?

Критерии оценки для задания 3

Оценено от 0 до 10. Правила поздней подачи и выставления повторных оценок, как в задании 1.

<u>Задание 4 Типа</u>	Домашние задания
------------------------------	------------------

В задании 4 основное внимание уделяется диссипативным системам, трению и активным средам

Пример задачи для задания 4:

Задача 2. Модель Виксека и модели динамики толпы (2 балла).

- (а) Напишите код для моделирования активных частиц с помощью модели Виксека.
- (б) Проанализируйте диапазон параметров модели, при которых наблюдается скопление людей.
- (в) Напишите код для моделирования потока пешеходов в узком проходе; используйте симметричные модели и модели с лево-правой асимметрией взаимодействия пешеходов.
- (д) проанализируйте диапазон параметров при формировании полос движения.

Критерии оценки для задания 4

Оценено от 0 до 6. Правила поздней подачи и повторной оценки, как в задании 1.

<u>Задание 5 Типа</u>	Групповой проект
------------------------------	------------------

Итоговый проект. Команды до 5 студентов решают открытый проект. Итоговые проекты потребуют либо применения знаний из разных частей курса, либо более глубокого изучения одной темы курса. В основном, проект будет сосредоточен либо на каком-либо интересном применении многомасштабного кинетического моделирования в реальном мире (медицина, промышленность, природа), либо на внедрении методов ML и искусственного интеллекта в существующие современные подходы для повышения эффективности методов. Студентам предлагается внести свои собственные проектные идеи, которые должны быть одобрены профессором Н. Бриллиантовым перед отправкой реферата проекта. Успешные проекты могут послужить основой для исследовательской статьи в научном журнале или патента.

Критерии оценки для задания 5

Логистика:

- В идеале на проект должно приходиться 3-5 студентов (объем проекта, состоящего из нескольких человек, должен быть соизмеримым; каждый студент должен отвечать за сопряженные подпроекты)
- Предложение: описание проекта на 1 странице + цели и контрольные точки. В документе представлена основная идея предложения и жизнеспособность проекта.
- Прогресс: предполагается этап в 3 страницы. Контрольные точки не будут оцениваться, они будут служить для самопроверки успеваемости учащихся и для получения возможности получить обратную связь о прогрессе учащихся,

а также о любых изменениях, которые могли быть внесены в цели проекта во время работы над проектом.

- Презентация: После презентации ожидается презентация продолжительностью 12 минут плюс 3 минуты на вопросы.
- Статья: Она должна быть оформлена в форме научной статьи. То есть все начинается с формулировки проблемы, с того, почему она важна, что в ней нового и интересного, каков современный уровень развития в этой области, ваш подход, ваши результаты, анализ ваших результатов и направления на будущее. Вам нужно кратко обрисовать предыдущие результаты, просто чтобы показать место вашей работы в современном исследовательском ландшафте, не переписывайте результаты предыдущих работ, особенно если они не имеют прямого отношения к пониманию вашего подхода.
- Оценка: Каждая команда оценит презентацию своих коллег. Шаблоны будут предоставлены в день презентации. Все эти баллы будут суммированы для итоговой оценки (40% от общей оценки).

6. Учебники и интернет-ресурсы

Необходимые учебники	ISBN-13 (or ISBN-10)
Krapivsky P.L., Redner A. and Ben-Naim E. A Kinetic View of Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2010.	9780521851039
Brilliantov N.V. and Pöschel T. Kinetic Theory of Granular Gases, Oxford University Press, Oxford, 2004.	9780199588138
Рекомендуемые учебники	
Van Kampen N. G. Stochastic Processes in Physics and Chemistry (North-Holland, Amsterdam, 2001)	9780444529657
Iserles A. A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2008	9780521734905
S. Redner, A Guide to First-Passage Processes (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).	9780521036917
P. Resibois and M. De Leener, Classical Kinetic Theory of Fluids (Wiley, New York, 1977).	9780471716945
Dorogovtsev S. N. and Mendes J. F. F. Evolution of Networks: From Biological Nets to the Internet and WWW, Oxford University Press, Oxford, 2003	9780199686711
A.-L. Barabasi and H. E. Stanley, Fractal Concepts in Surface Growth (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).	9780521483186
S. K. Frieland, Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior (Wiley, New York, 1977).	9780195129991

Веб-ресурсы (ссылки)	Описание
https://people.maths.ox.ac.uk/erban/Education/StochReacDiff.pdf	

7. Оборудование

Программное обеспечение
Python 3.10+

Оборудование

Ноутбук с предустановленным python