

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Кафедра радиофизики и электроники

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б.1.В.ОД.2 Математическое моделирование физических процессов»

Уровень высшего образования

БАКАЛАВРИАТ

Направление подготовки

03.03.03 Радиофизика

(код и наименование направления подготовки)

Квантовая электроника

(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Тип образовательной программы

Программа академического бакалавриата

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Год набора 2017

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра радиофизики и электроники

наименование кафедры

протокол № 6 от "24" февраля 2017 г.

Заведующий кафедрой

Кафедра радиофизики и электроники

наименование кафедры

Чмерева
подпись

Т.М. Чмерева

расшифровка подписи

Исполнители:

доцент

должность

К
подпись

Кручинин Н.Ю.

расшифровка подписи

должность

подпись

расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методической комиссии по направлению подготовки

03.03.03 Радиофизика

код наименование

Чмерева
личная подпись

Т.М. Чмерева

расшифровка подписи

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки

Грицай
личная подпись

Н.Н. Грицай

расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета

Стрекаловская
личная подпись

А.Д. Стрекаловская

расшифровка подписи

№ регистрации 46974

© Кручинин Н.Ю., 2017

© ОГУ, 2017

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цель (цели) освоения дисциплины:

обучение студентов основам математического моделирования физических процессов, привитие им практических навыков в применении полученных теоретических знаний к решению конкретных задач.

Задачи:

изучение основных понятий математического моделирования физических процессов, изучение основных программных комплексов для моделирования методами молекулярной динамики и функционала плотности,

проведение научных исследований поставленных проблем с использованием математического моделирования;

выбор технических средств, подготовка оборудования, работа на высокопроизводительных вычислительных установках;

выбор необходимых методов исследования;

анализ получаемой в результате моделирования информации с использованием современной вычислительной техники.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам (модулям) вариативной части блока 1 «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б.1.Б.10 Механика, Б.1.Б.11 Молекулярная физика, Б.1.Б.12 Электричество и магнетизм, Б.1.Б.13 Оптика, Б.1.Б.14 Атомная физика, Б.1.Б.15 Физика ядра и элементарных частиц, Б.1.Б.17 Информатика и программирование, Б.1.Б.18 Методы математической физики*

Постреквизиты дисциплины: *Б.1.В.ДВ.5.1 Кинетика нелинейных фотопроцессов*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
Знать: методику совершенствования личности Уметь: планировать учебный день Владеть: опытом самоорганизации и самообразования	ОК-7 способностью к самоорганизации и самообразованию
Знать: метод молекулярной динамики, метод функционала плотности Уметь: использовать моделирование молекулярно-динамическое моделирование и моделирование методом функционала плотности. Владеть: терминологией математического моделирования	ОПК-1 способностью к овладению базовыми знаниями в области математики и естественных наук, их использованию в профессиональной деятельности
Знать: приемы самообразования. Уметь:	ОПК-2 способностью самостоятельно приобретать новые знания, используя

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
<p>использовать методы математического моделирования для решения физических задач.</p> <p>Владеть: навыком использования современных программных комплексов для математического моделирования.</p>	<p>современные образовательные и информационные технологии</p>
<p>Знать: приемы решения стандартных задач методом молекулярной динамики и функционала плотности.</p> <p>Уметь: решать стандартные задачи профессиональной деятельности.</p> <p>Владеть: способами решения задач профессиональной деятельности.</p>	<p>ОПК-3 способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности</p>
<p>Знать: - основные принципы работы с библиографическими данными и информационно-коммуникационными системами. - знать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны.</p> <p>Уметь: - выполнять библиографический поиск, как по тематике профессиональной деятельности, так и в новых областях знаний; - проводить обмен профессиональной информацией с учетом требований информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны.</p> <p>Владеть: - навыками поиска, обмена и защиты информации, в том числе защиты государственной тайны</p>	<p>ОПК-4 способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны</p>
<p>Знать: принцип работы ПК.</p> <p>Уметь: Решать задачи математического моделирования на компьютере.</p> <p>Владеть: Навыком работы с программами NAMD и ABINIT.</p>	<p>ПК-3 владением компьютером на уровне опытного пользователя, применению информационных технологий</p>
<p>Знать: -основные охранные документы для защиты интеллектуальной собственности</p> <p>Уметь: -составлять заявку на изобретение, полезную модель, способ получения продуктов и изделий с заданными свойствами</p> <p>Владеть: -навыками созданий формул изобретения, стиля документа, характерного для написания заявок на изобретение и патентов</p>	<p>ПК-4 владением методами защиты интеллектуальной собственности</p>
<p>Знать: - основы математического моделирования физических процессов.</p> <p>Уметь: - применять полученные теоретические знания к решению практических задач.</p> <p>Владеть:</p>	<p>ПК-5 способностью внедрять готовые научные разработки</p>

Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Формируемые компетенции
- навыками работы с программными комплексами для математического моделирования физических процессов	

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц (144 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	7 семестр	всего
Общая трудоёмкость	144	144
Контактная работа:	50,25	50,25
Практические занятия (ПЗ)	50	50
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: - выполнение индивидуального творческого задания (ИТЗ); - выполнение расчетно-графического задания (РГЗ); - написание реферата (Р); - написание эссе (Э); - самостоятельное изучение разделов (перечислить); - самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий); - подготовка к практическим занятиям; - подготовка к коллоквиумам; - подготовка к рубежному контролю и т.п.)	93,75	93,75
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	диф. зач.	

Разделы дисциплины, изучаемые в 7 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Молекулярная динамика микроканонического ансамбля.	32		10		20
2	Молекулярная динамика канонического и изотермически-изобарического ансамблей	18		6		12
3	Эмпирические силовые поля	24		10		14
4	Крупнозернистая молекулярная динамика	18		6		12
5	Метод функционала плотности	34		12		24
6	Ab initio молекулярная динамика	18		6		12
	Итого:	144		50		94
	Всего:	144		50		94

4.2 Содержание разделов дисциплины

1. Молекулярная динамика микроканонического ансамбля

Метод молекулярной динамики. Ланжевенская динамика. Ланжевенская динамика. Вычислительные алгоритмы. Задание начальных координат и скоростей. Выбор шага времени интегрирования. Устойчивость интегрирования. Периодические граничные условия.

2. Молекулярная динамика канонического и изотермически-изобарического ансамблей

Молекулярно-динамическое моделирование при постоянной температуре: термостаты Берендсена, Андерсена, Нозе-Гувера. Молекулярная динамика NPT-ансамбля: баростаты Берендсена, Андерсена, Нозе-Гувера.

3. Эмпирические силовые поля

Функция потенциальной энергии: валентные и невалентные взаимодействия. Силовые поля AMBER, CHARMM, MM+. Разработка эмпирических силовых полей.

4. Крупнозернистая молекулярная динамика

Крупнозернистое МД-моделирование. Силовое поле MARTINI.

5. Метод функционала плотности

Аппроксимация Томаса-Ферми-Дирака. Теоремы Хоэнберга – Кона. Метод Кона-Шама. Решение уравнений Кона-Шама. Нестационарная теория функционала плотности.

6. Ab initio молекулярная динамика

Молекулярная динамика из первых принципов: Ehrenfest, Born-Oppenheimer, Car-Parrinello.

4.3 Практические занятия (семинары)

№ занятия	№ раздела	Тема	Кол-во часов
1-5	1	Молекулярная динамика микроканонического ансамбля.	10
6-8	2	Молекулярная динамика канонического и изотермически-изобарического ансамблей	6
9-13	3	Эмпирические силовые поля	10
14-16	4	Крупнозернистая молекулярная динамика	6
17-22	5	Метод функционала плотности	12
23-25	6	Ab initio молекулярная динамика	6
		Итого:	50

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Кручинин, Н. Ю. Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н. Ю. Кручинин; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. проф. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2015. - ISBN 978-5-7410-1241-3. - 107 с.

5.2 Дополнительная литература

1. Кручинин, Н. Ю. Метод функционала плотности для расчета свойств молекул и твердых тел [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки 03.03.03 Радиофизика и 03.04.02 Физика / Н. Ю. Кручинин; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2017. - ISBN 978-5-7410-1739-5. - 128 с.

5.3 Периодические издания

1. Журнал «Успехи физических наук».

5.4 Интернет-ресурсы

1. <https://ufn.ru/> - журнал «Успехи физических наук».
2. <http://kvant.mccme.ru/> - журнал «Квант»

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы современных информационных технологий

1. NAMD – программный комплекс для молекулярно-динамическое моделирования, лицензия GNU GPL. Режим доступа: <http://www.ks.uiuc.edu>. .
2. GROMACS – программный комплекс для молекулярно-динамическое моделирования, лицензия GNU GPL. Режим доступа: <http://www.gromacs.org/>.
3. ABINIT– программный комплекс для расчетов в рамках теории функционала плотности, лицензия GNU GPL. Режим доступа: <http://www.abinit.org/>.
4. Quantum ESPRESSO - программный комплекс для расчетов в рамках теории функционала плотности, лицензия GNU GPL. Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org/>.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.

К рабочей программе прилагаются:

- Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.