Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра радиофизики и электроники

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.1 Математическое моделирование физических процессов»

Уровень высшего образования

БАКАЛАВРИАТ

Направление подготовки
03.03.03 Радиофизика
(код и наименование направления подготовки)

Физика наноматериалов
(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Квалификация
Бакалавр

Форма обучения
Очная

Год набора 2025

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.В.1 Математическое моделирование физических процессов*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра радиофизики и электроники
наименование кафедры

протокол № 5 от 18 февраля 2025 г.

Заведующий кафедрой
Кафедра радиофизики и электроники _____ А.П. Русинов
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:

доцент _____ Кручинин Н.Ю.
должность *подпись* *расшифровка подписи*

_____ _____ _____
должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по направлению подготовки
03.03.03 Радиофизика
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом формирования фонда и научной обработки документов
Гнав. библиограф _____ С.А. Бектимирова
личная подпись *расшифровка подписи*

Уполномоченный по качеству факультета _____ А.Д. Стрекаловская
личная подпись *расшифровка подписи*

№ регистрации _____

© Кручинин Н.Ю., 2025
© ОГУ, 2025

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 Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.1 Философия, Б1.Д.Б.12 Информационные технологии и программирование*

Постреквизиты дисциплины: *Отсутствуют*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ПК*-1 Способен применять на практике профессиональные знания и умения в сфере производства, внедрения и эксплуатации электронных приборов и систем различного назначения, полученные при освоении профильных физических дисциплин	ПК*-1-В-1 Знает фундаментальные основы специализированных знаний в области радиоэлектроники, телекоммуникационных систем и антенных комплексов ПК*-1-В-2 Владеет специализированными знаниями в области физики и смежных естественнонаучных дисциплин ПК*-1-В-3 Умеет решать профессиональные задачи с применением специализированных физико-математических и естественнонаучных знаний, методов научного анализа и моделирования	**Знать:** метод молекулярной динамики, метод функционала плотности **Уметь:** использовать моделирование молекулярно-динамическое моделирование и моделирование методом функционала плотности. **Владеть:** терминологией математического

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
		моделирования
ПК*-2 Способен проводить научные исследования в избранной экспериментальной или теоретической области с применением современной приборной базы и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	ПК*-2-В-1 Знает основные методы проведения теоретического и экспериментального исследования в сфере профессиональной деятельности ПК*-2-В-2 Умеет решать профессиональные задачи с применением современной приборной базы и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта	**Знать:** - основы математического моделирования физических процессов. **Уметь:** - применять полученные теоретические знания к решению практических задач. **Владеть:** - навыками работы с программными комплексами для математического моделирования физических процессов

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 академических часа).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов		
	7 семестр	8 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**72**	**72**	**144**
Контактная работа:	**30,25**	**22,25**	**52,5**
Лекции (Л)	16	8	24
Лабораторные работы (ЛР)	14	14	28
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25	0,5
Самостоятельная работа: *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;* *- изучение разделов курса в системе электронного обучения;* *- подготовка к лабораторным занятиям;* *- подготовка к рубежному контролю и т.п.)*	**41,75**	**49,75**	**91,5**
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**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	32	8		8	16

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
	ансамбля.					
2	Молекулярная динамика канонического и изотермически-изобарического ансамблей	22	4		4	14
3	Эмпирические силовые поля	18	4		2	12
	Итого:	72	16		14	42

Разделы дисциплины, изучаемые в 8 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
4	Крупнозернистая молекулярная динамика	30	4		6	20
5	Метод функционала плотности	22	2		4	16
6	Ab initio молекулярная динамика	20	2		4	14
	Итого:	72	8		14	50
	Всего:	144	24		28	92

4.2 Содержание разделов дисциплины

1. Молекулярная динамика микроканонического ансамбля

Метод молекулярной динамики. Ланжевеновская динамика. Ланжевеновская 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-Шэма. Решение уравнений Кона-Шэма. Нестационарная теория функционала плотности.

6. Ab initio молекулярная динамика

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

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1-4	1	Молекулярная динамика микроканонического ансамбля.	8
5-6	2	Молекулярная динамика канонического и изотермически-изобарического ансамблей	4
7	3	Эмпирические силовые поля	2
8-10	4	Крупнозернистая молекулярная динамика	6
11-12	5	Метод функционала плотности	4
13-14	6	Ab initio молекулярная динамика	4

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
		Итого:	28

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Кручинин, Н. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование макромолекул [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 науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ОГУ. - 2018. - ISBN 978-5-7410-2143-9. - 103 с. Режим доступа: http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/83818_20181002.pdf.

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. Режим доступа: http://artlib.osu.ru/web/books/metod_all/36387_20170503.pdf.

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. Операционная система РЕД ОС
2. Пакет офисных приложений LibreOffice
3. Программная система для организации видео-конференц-связи Webinar.ru
4. NAMD – программный комплекс для молекулярно-динамическое моделирования, лицензия GNU GPL. Режим доступа: http://www.ks.uiuc.edu. .
5. GROMACS – программный комплекс для молекулярно-динамическое моделирования, лицензия GNU GPL. Режим доступа: http://www.gromacs.org/.
6. ABINIT– программный комплекс для расчетов в рамках теории функционала плотности, лицензия GNU GPL. Режим доступа: http://www.abinit.org/.
7. 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.