

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКО - ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра теоретической физики и нанотехнологий



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научно-методической
и учебной работе

Е.И. Скафа Е.И. Скафа

«22» апреля 2020 г.

МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Методы математического моделирования

Направление подготовки: 28.03.03 Наноматериалы

Профиль подготовки:

Образовательная программа: бакалавриат

Квалификация: академический бакалавр

Форма обучения: очная, очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан физико-технического факультета

_____ О.А. Фоменко

«17» апреля 2020 г.

МП



Программа учебной дисциплины «Методы математического моделирования» составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования (ГОС ВПО) Донецкой Народной Республики (ДНР) по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР от 28 сентября 2016 г. № 987; Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.; учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 28.03.03 Наноматериалы, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Старший преподаватель кафедры
теоретической физики и нанотехнологий

В.Д.Пойманов

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий

Протокол №15 от «02» апреля 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.Н.Варюхин

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией физико-технического факультета

Протокол № 5 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

В.Н.Котенко

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

«Методы математического моделирования» является дисциплиной базовой части Профессионального Блока по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, сформированные в процессе изучения предметов «Механика», «Методы анализа и контроля наноструктурированных материалов и систем», «Физика атома и атомного ядра», «Методы математической физики», «Математический анализ», «Дифференциальные уравнения», «Тензорный анализ» на предыдущем уровне образования. Полученные знания используются студентами во время выполнения учебной и производственной практики, при написании выпускной квалификационной работы.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	28.03.03 Наноматериалы	
Профиль		
Образовательная программа	бакалавриат	
Квалификация	академический бакалавр	
Количество содержательных модулей	2	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	дисциплина базовой части	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	МК, экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	3	3
Год подготовки	3	3
Семестр	6	
Количество часов	108	108
- лекционных	16	2
- практических, семинарских	32	6
- лабораторных		
- самостоятельной работы	60	100
в т.ч. индивидуальное задание		
Недельное количество часов,	3	8
в т.ч. аудиторных	3	8

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель - заключается в формировании у будущих бакалавров по направлению подготовки 28.03.03 «Наноматериалы» умений и компетенций для обеспечения эффективного применения математических моделей и методов проведения практических требований реальных потребностей преподавательской и научно-исследовательской деятельности с учетом достижений современного уровня науки в этой области.

Задача: обеспечение фундаментальных знаний основных технологий высокопроизводительных вычислений, глубокое понимание методов и приближений,

используемых при моделировании твердых тел из первых принципов, подготовку будущего бакалавра к самостоятельной научной работы в области вычислительной нанофизики.

Требования к результатам освоения дисциплины. Процесс изучения дисциплины «Методы математического моделирования» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО ДНР по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 28.03.03 Наноматериалы.

а) общекультурных (ОК):

- способность к самоорганизации и самообразованию (ОК-7);
- способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановке цели и выбору путей ее достижения (ОК-10);
- способность понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны (ОК-13);
- способность работать с информацией в глобальных компьютерных сетях (ОК- 14);

б) общепрофессиональных (ОПК):

- способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей (ОПК-2);
- способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач (ОПК-3);
- способность применять основы методов исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств наноматериалов и наносистем неорганической и органической природы, в твердом, жидком, гелеобразном, аэрозольном состоянии, включая нанопленки и наноструктурированные покрытия, внутренние и внешние границы раздела фаз, а также физических и химических процессов в них или с их участием (ОПК-4);
- способность использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-6);

в) профессиональных (ПК):

научно-исследовательская и проектная деятельность:

- способность использовать современные информационно-коммуникационные технологии, глобальные информационные ресурсы в научно-исследовательской деятельности в области материаловедения и технологии наноматериалов и наносистем (ПК-1);
- способность использовать на практике современные представления наук о свойствах веществ и материалов при переходе их в наноразмерное состояние (ноль, одно и двухмерное), о влиянии размера на свойства веществ и материалов, взаимодействии наноматериалов и наносистем с окружающей средой (ПК-2);
- способность применять навыки использования (под руководством) методов моделирования, оценки, прогнозирования и оптимизации технологических процессов и свойств наноматериалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов (ПК-4).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- архитектуру параллельных вычислительных систем;
- технологии параллельного программирования;
- основные методы расчета электронной структуры твердых тел и наночастиц.
- суть облачных вычислений;

уметь:

- работать на учебном кластере;
- вести информационный поиск необходимых для научных исследований источников;
- выбирать методы моделирования физических свойств для определенных твердых тел и наноматериалов;
- рассчитывать электронную структуру и основные физические свойства кристаллических твердых тел;
- использовать метод Монте-Карло для анализа простых спиновых гамильтонианов.

владеть:

- различными методами математического моделирования ;
- навыками в использовании специальных программных пакетов.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и тема	Краткое содержание темы
Содержательный модуль 1 «Решение уравнения Шредингера»	
Тема 1. Современные методы молекулярной динамики.	Современные методы молекулярной динамики.
Тема 2. Метод Монте-Карло для спиновых систем.	Метод Монте-Карло для спиновых систем.
Тема 3. Квантовый метод Монте-Карло.	Квантовый метод Монте-Карло.
Тема 4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
Тема 5. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.	Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.
Содержательный модуль 2 «Метод псевдопотенциала»	
Тема 1. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных	Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.

решений.	
Тема 2. Теория функционала электронной плотности.	Теория функционала электронной плотности.
Тема 3. Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.	Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.
Тема 4. Метод псевдопотенциала.	Метод псевдопотенциала.
Тема 5. Первопринципальная молекулярная динамика.	Первопринципальная молекулярная динамика.
Тема 6. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

Тематический план

Содержательный модуль 1 «Решение уравнения Шредингера»												
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов											
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения					
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Современные методы молекулярной динамики.	11	2	3		6		10,8	0,2	0,6		10	
Тема 2. Метод Монте-Карло для спиновых систем.	11	2	3		6		10,8	0,2	0,6		10	
Тема 3. Квантовый метод Монте-Карло.	10	1	3		6		10,8	0,2	0,6		10	
Тема 4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	10	1	3		6		10,8	0,2	0,6		10	
Тема 5. Многоэлектронные	12						10,8	0,2	0,6		10	

атомы. Метод Хартри-Фока.		2	4		6						
Итого по содержательному модулю 1	54	8	16		30		54	1	3		50

Тематический план

Содержательный модуль 2 «Метод псевдопотенциала»											
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов										
	Очная форма обучения						Заочная форма обучения				
	всего	в т.ч.					всего	в т.ч.			
		лекции	практические	лабораторные	самостоятель- ная работа	индивидуаль- ная работа		лекции	практические	лабораторные	самостоятель- ная работа
Тема 1. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.	9	1	3		5		8,6	0,1	0,5		8
Тема 2. Теория функционала электронной плотности.	9	1	3		5		8,6	0,1	0,5		8
Тема 3. Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.	10	2	3		5		8,6	0,1	0,5		8
Тема 4. Метод псевдопотенциала.	9	2	2		5		8,7	0,2	0,5		8
Тема 5. Первопринципиальная молекулярная динамика.	8	1	2		5		8,7	0,2	0,5		8
Тема 6. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	9	1	3		5		10,8	0,3	0,5		10
Итого по содержательному модулю 2	54	8	16		30		54	1	3		50
Итого по двум содержательным модулям	108	16	32		60		108	2	6		100

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Темы лекционных занятий

<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Современные методы молекулярной динамики.	2
2	Метод Монте-Карло для спиновых систем.	2
3	Квантовый метод Монте-Карло.	1
4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	1
5	Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.	2
6	Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.	1
7	Теория функционала электронной плотности.	1
8	Метод присоединенных плоских волн. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн.	2
9	Метод псевдопотенциала.	2
10	Первопринципиальная молекулярная динамика.	1
11	Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	1
	ВСЕГО	16

Темы практических занятий

<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1	Современные методы молекулярной динамики.	3
2	Метод Монте-Карло для спиновых систем.	3
3	Квантовый метод Монте-Карло.	3
4	Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	3
5	Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.	4
6	Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.	1
7	Теория функционала электронной плотности.	1
8	Метод присоединенных плоских волн. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн.	2
9	Метод псевдопотенциала.	2
10	Первопринципиальная молекулярная динамика.	1
11	Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	1
	ВСЕГО	32

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Организация самостоятельной работы студентов

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	Молекулярный бильярд.	5
2	Броуновская динамика.	5
3	Метод Монте-Карло для классической модели Гейзенберга	5
4	Спиновое стекло.	5
5	Метод Ванга-Ландау (Wang-Landau).	5
6	Стационарные решения одномерного уравнения Шредингера.	5
7	Приближение Томаса-Ферми.	5
8	Аппроксимации для обменно-корреляционной энергии.	5
9	Метод линеаризованных МТ-орбиталей	5
10	Исследование электронной структуры простых металлов в пакете Миндлаб.	5
11	Ультрамягкие и сохраняющие норму псевдопотенциалы.	3
12	Электронная структура графена	3
13	Электронная структура малых наночастиц.	2
14	Адаптация программ к работе в «облачной среде».	2
	ВСЕГО	60

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ *(не предусмотрено рабочим планом)*

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

1. Современные методы молекулярной динамики.
2. Монте-Карло для спиновых систем.
3. Квантовый метод Монте-Карло.
4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
5. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.
6. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
7. Теория функционала электронной плотности.
8. Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.
9. Метод псевдопотенциала.
10. Первопринципальная молекулярная динамика.
11. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

9. ОБРАЗЕЦ МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

(образец варианта и критерии оценивания)

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет физико-технический

Направление подготовки: **28.03.03 Наноматериалы**

Профиль:

Программа подготовки:

бакалавриат

Семестр
Учебная дисциплина

6
Методы математического моделирования

**МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА
ВАРИАНТ №1**

1. Квантовый метод Монте-Карло.
2. Теория функционала электронной плотности.
3. Метод псевдопотенциала.

Утверждено на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий,
протокол № ____ от «__» _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой
Преподаватель

Критерии оценивания модульного контроля

<i>Номер задания</i>	<i>Количество баллов</i>
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

10. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

Теоретические вопросы к экзамену

1. Современные методы молекулярной динамики.
2. Метод Монте-Карло для спиновых систем.
3. Квантовый метод Монте-Карло.
4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
5. Многоэлектронные атомы.
6. Метод Хартри-Фока.
7. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
8. Теория функционала электронной плотности.
9. Метод присоединенных плоских волн.
10. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.
11. Первопринципиальная молекулярная динамика.
12. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет физико-технический

Направление подготовки: **28.03.03 Наноматериалы**

Профиль:

Программа подготовки: **бакалавриат**

Семестр
Учебная дисциплина

6
Методы математического моделирования

БИЛЕТ №1

1. Метод присоединенных плоских волн.
2. Метод Хартри-Фока.
3. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

Утверждено на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий,
протокол № ____ от «____» _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой
Экзаменатор

Критерии оценивания экзамена

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	15
Задание 2	15
Задание 3	20
Всего	50 баллов

11. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу «Методы математического моделирования» предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, выполнение индивидуальной работы и экзамена. Экзамен сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС		Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	
max 10 баллов	max 10 баллов	max 30 баллов	100

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии	не зачтено

		обязательного набора дополнительных баллов	
--	--	--	--

12. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные и практические занятия по учебной дисциплине «Методы математического моделирования» проводятся в Компьютерном классе №304. Оборудован комплектом учебной мебели на 28 посадочных мест, комплектом рабочего места преподавателя, меловой доской, 10 компьютеров с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, 1 сетевой коммутатор, 1 wi-fi роутер, 1 мультимедийный проектор, 1 экран переносной.

Самостоятельная работа студентов проходит в читальном зале № 4 периодической литературы, укомплектован учебной мебелью на 31 посадочное место, оснащен компьютером в комплекте (1 шт.), расположен по адресу г. Донецк, ул. Университетская, 24, каб. 19.

Индивидуальные и групповые консультации студентам для проведения самостоятельной работы предоставляются в кабинете кафедры теоретической физики и нанотехнологий, укомплектованном комплектом мебели на 12 посадочных мест, оснащенном компьютером в комплекте (1 шт.), принтером, сканером, расположенном по адресу г. Донецк, пр. Театральный 13, ауд. 256.

13. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№ п/п	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
Основная литература			
1.	Методы математического моделирования и вычислительной диагностики : сб. тр. фак. вычисл. математики и кибернетики МГУ / Под ред. А. Н. Тихонова, А. А. Самарского. - М. : Изд-во МГУ, 1990. - 300 с.	3	
2.	Хеерман, Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман ; пер. с англ. В. Н. Задкова ; под ред. С. А. Ахманова. - М. : Наука, 1990. - 175 с.	3	
3.	Воеводин, В. В. Параллельные вычисления : Учеб. пособие для вузов по направлению "Прикладная математика и информатика" / В. В. Воеводин, Вл. В. Воеводин. - СПб. : БХВ-Петербург, 2002. - 608 с.	3	
Дополнительная литература			
4.	Бондаренко, Н. С. Методы математического моделирования в среде пакета Maple [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие по дисциплине "Методы математического моделирования" / Н. С. Бондаренко ; ГОУ ВПО Донецкий национальный университет, Факультет математики и информационных технологий, Кафедра прикладной механики и компьютерных технологий. - Донецк : ГОУ ВПО "ДонНУ", 2017. - Электронные		+

	данные (1 файл).		
5.	Лекции по теории функционала электронной плотности / [сост. А. В. Головчан] ; Донецкий нац. ун-т. - Донецк : ДонНУ, 2012. - 40 с.	1	

14. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://donnu.ru/> – сайт ДонНУ.

<http://library.donnu.ru/> – сайт библиотеки

15. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ № 46484614);
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия № 46472919);
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения: FreeLab, Scilab, Free Pascal, Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий с изменениями (без изменений) на 20__ год.

Протокол № __ от “__” _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий с изменениями (без изменений) на 20__ год.

Протокол № __ от “__” _____ 20__ г.

Заведующий кафедрой _____