

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

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

Физико-технический факультет
Кафедра общей физики и дидактики физики



П.А. Машаров

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКЕ

Укрупненная группа направлений подготовки	03.00.00 Физика и астрономия
Программа высшего образования	Программа магистратуры
Направление подготовки	03.04.02 Физика
Магистерская программа	Компьютерная физика
Квалификация	Магистр
Форма обучения	Очная

Рабочая программа адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2024

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование в физике» для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика (магистерская программа: Компьютерная физика), составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 03.04.02 Физика, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 07.08.2020 № 914 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2024 года.

Разработчик:
доцент, к.ф.-м.н., доцент



А. В. Головчан

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры общей физики и дидактики физики.

Протокол от 26.03.2024 г. № 12

Заведующий кафедрой



А. В. Безус

СОГЛАСОВАНО:

И. о. декана физико-технического
факультета
28.03.2024 г.

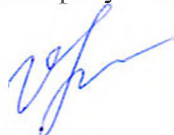


С. А. Фоменко

Учебно-методическая комиссия физико-технического факультета.

Протокол от 27.03.2024 г. № 2.

Председатель



В. Н. Котенко

Руководители основной профессиональной
образовательной программы:

кандидат физико-математических наук



А. В. Безус

26.03.2024 г.

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы магистратуры:

Математические методы теоретической физики

Объектно-ориентированное программирование

1.2. Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

Пользовательские прикладные программы для физиков

Выполнение и защита выпускной квалификационной работы.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы	03.04.02 Физика (магистерская программа: Компьютерная физика)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ОД.4. Компьютерное моделирование в физике
Часть образовательной программы	Вариативная часть
Количество зачетных единиц / всего часов	4,5 / 162

2.2. Распределение часов по периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы + контактная	всего	
Очная	1	2	15	45	0	102	162	экзамен
Заочная								

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель дисциплины : состоит в формировании у будущих магистров умений и компетенций для обеспечения эффективного применения математических моделей и методов относительно практических требований реальных нужд преподавательской и научно-исследовательской деятельности с учетом достижений современного уровня науки в этой области.

**4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ
ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ
ИНДИКАТОРЫ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ПК-2. Способен проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта;	ПК-2.1. Определяет цель проведения вычислительного эксперимента и закономерности физических процессов, лежащих в основе используемой модели	<p>ПК-2.1.1 знать сущность компьютерного моделирования; ПК-2.1.2 знать основы метода молекулярной динамики; ПК-2.1.3 знать основы метода Монте-Карло;</p> <p>ПК-2.1.4 уметь вести информационный поиск необходимых для научных исследований источников; ПК-2.1.5 уметь формулировать математические модели физических процессов; ПК-2.1.6 уметь избирать исследовательский приемы моделей; ПК-2.1.7 владеть технологиями применения вычислительных методов для решения конкретных задач из различных областей математики и ее приложений; ПК-2.1.8 владеть основными приемами использования вычислительных методов при решении различных задач профессиональной деятельности.</p>
	ПК-2.2. Анализирует современные экспериментальные, теоретические результаты исследований по заданной проблеме	<p>ПК-2.2.1 уметь ориентироваться в базовых методах и моделях, которые используются в современной физике; ПК-2.2.2 уметь анализировать результаты компьютерного моделирования. ПК-2.2.3 владеть навыками практической оценки точности результатов, полученных в ходе решения тех или иных вычислительных задач, на основе теории приближений;</p>

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1 Математические методы статистической физики	
Тема 1.	Современные методы молекулярной динамики. Метод Броуновской динамики. Вариации метода молекулярной динамики для различных ансамблей.
Тема 2.	Метод Монте-Карло для спиновых систем. Основы метода Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Метод Монте-Карло для модели Изинга. Метод Монте-Карло для модели Гейзенберга.
Тема 3.	Метод Монте-Карло для квантовых спиновых моделей. Метод Монте-Карло для систем с непрерывным временем.
Раздел 2. Моделирование физических свойств из первых принципов	
Тема 4.	Решения уравнения Шредингера для атома водорода.
Тема 5.	Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока
Тема 6.	Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
Тема 7.	Теория функционала электронной плотности.
Тема 8.	Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.
Тема 9.	Метод псевдопотенциала.
Тема 10.	Первопринципная молекулярная динамика.
Тема 11.	Методы расчета электронной структуры и свойств низкоразмерных систем.
Раздел 3. Технологии параллельных вычислений	
Тема 12.	Облачные вычисления. Архитектура параллельных вычислительных систем.
Тема 13.	Параллельное программирование. Адаптация алгоритмов.
Тема 14.	Технологии параллельного программирования: OpenMP, MPI, CUDA, OpenCL.

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – _1_, семестр – 1

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+ конт	Всего
Тема 1.	1	4		7	12
Тема 2.	2	4		7	13
Тема 3.	1	4		7	12
Тема 4.	1	3		7	11
Тема 5.	1	3		7	11
Тема 6.	1	3		7	11
Тема 7.	1	3		7	11
Тема 8.	1	3		7	11
Тема 9.	1	3		7	11
Тема 10.	1	3		7	11
Тема 11.	1	3		8	12
Тема 12.	1	3		8	12

Тема 13.	1	3		8	12
Тема 14.	1	3		8	12
ИТОГО ЗА СЕМЕСТР	15	45		102	162

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

1. Метод Броуновской динамики.
2. Метод молекулярной динамики для микроканонического ансамбля.
3. Метод молекулярной динамики для канонического ансамбля.
4. Метод молекулярной динамики для большого канонического ансамбля.
5. Стохастические численные методы интегрирования.
6. Алгоритм генерации случайных чисел с равномерным законом распределения.
7. Алгоритм Метрополиса.
8. Метод Монте-Карло для модели Изинга.
9. Метод Монте-Карло для модели Гейзенберга.
10. Метод Монте-Карло для квантовых спиновых моделей.
11. Метод Монте-Карло для систем с непрерывным временем.
12. Решения уравнения Шредингера для атома водорода.
13. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока
14. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
15. Теория функционала электронной плотности.
16. Метод присоединенных плоских волн.
17. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн.
18. Метод псевдопотенциала.
19. Первопринципная молекулярная динамика.
20. Методы расчета электронной структуры и свойств низкоразмерных систем.
21. Облачные вычисления. Архитектура параллельных вычислительных систем.
22. Параллельное программирование. Адаптация алгоритмов.
23. Технологии параллельного программирования: OpenMP.
24. Технологии параллельного программирования: MPI.
25. Технологии параллельного программирования: CUDA.
26. Технологии параллельного программирования: OpenCL.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже. Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

8.1. Семестр 1

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-3	Организационно-учебная работа в аудитории	30
	Самостоятельная работа	30
ИТОГО		60
Экзамен		40
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено
75-79	C		зачтено
70-74	D	удовлетворительно	зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ И ИНВАЛИДОВ

В ходе реализации дисциплины используются следующие дополнительные методы обучения, текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в зависимости от их индивидуальных особенностей:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - для выполнения задания при необходимости предоставляется увеличивающее устройство; возможно также использование собственных увеличивающих устройств;
 - письменные задания оформляются увеличенным шрифтом.
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - лекции оформляются в виде электронного документа;
 - письменные задания выполняются на компьютере в письменной форме;
 - экзамен проводится в письменной форме на компьютере; возможно проведение в форме тестирования.
- 3) для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - лекции оформляются в виде электронного документа, доступного с помощью компьютера со специализированным программным обеспечением;
 - письменные задания выполняются на компьютере;
 - экзамен и зачёт проводятся в устной форме или выполняются в письменной форме на компьютере.

При необходимости предусматривается увеличение времени для подготовки ответа.

Процедура проведения промежуточной аттестации для обучающихся устанавливается с учётом их индивидуальных психофизических особенностей. Промежуточная аттестация может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.

Обеспечивается доступ к информационным и библиографическим ресурсам в сети Интернет для каждого обучающегося в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

- 1) для слепых и слабовидящих:
 - в печатной форме увеличенным шрифтом;
 - в форме электронного документа;
- 2) для глухих и слабослышащих:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.
- 3) для обучающихся с нарушениями опорно-двигательного аппарата:
 - в печатной форме;
 - в форме электронного документа.

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в 4-м учебном корпусе (г. Донецк, пр. Театральный, д. 13). Для проведения лекционных занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для выполнения лабораторных работ требуется лаборатории со специализированным оборудованием, которое отвечает современным требованиям цифрового образования: имеет в наличии большое количество различных типов датчиков, которые подключаются к ноутбуку (планшету) и позволяют осуществлять сбор экспериментальных данных, графический анализ данных, решение математических уравнений, обработку экспериментальных данных.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете кафедры общей физики и дидактики физики (ауд. 220).

Обучающиеся имеют возможность использовать учебные материалы по дисциплине, размещенные на платформе Moodle Центра дистанционного образования ФГБОУ ВО «ДонГУ». При изучении дисциплины применяются электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов платформы дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

11. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

11.1. Основная литература

1. Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электронного газа. – М.:Мир, 1987. – 400 с.
2. Немошкаленко В.В., Антонов В.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. – Киев: Наук. думка, 1985. – 408 с.

3. Немошкаленко В.В., Кучеренко Ю.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах. – Киев: Наук. думка, 1986. – 296 с.
4. Барьяхтар В.Г., Зароченцев Е.В., Троицкая Е.П. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Атомные свойства металлов. – Киев: Наук. думка, 1990. – 376 с.
5. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
6. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
7. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. – М.: МАКС Пресс, 2009. – 280 с.
8. Беленков Е.А., Ивановская В.В., Ивановский А.Л., Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. – Екатеринбург: УрО РАН, 2008. – 169 с.
9. Singh D.J., Nordstrom L. Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW Method (2-nd edition). – Springer, 2006. – 134 pp.

11.2. Дополнительная литература

1. Хартри Д. Расчеты атомных структур. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960. – 272с.
2. Головчан А.В. Лекции по теории функционала электронной плотности. – Донецк: ДонГУ, 2012. – 40 с.

12. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ; Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.
2. **eLIBRARY.RU:** научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
3. Научная электронная библиотека **«КиберЛенинка»:** сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/>. – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
4. Электронно-библиотечная система **«Лань»:** [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
5. **ЭБС Юрайт:** электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://biblio-online.ru> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.
6. **Электронно-библиотечная система ДонГУ:** сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
7. **Электронный каталог** Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.
8. **Электронный архив** ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 01.09.2023). – Режим доступа: свободный.

13. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).