

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

КАФЕДРА ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОДОБРЕНО УМС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/08-577

от 29.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
8	2	72	22	22	0		28	0	3
Итого	2	72	22	22	0	0	28	0	

АННОТАЦИЯ

Дисциплина посвящена методам молекулярно-динамического моделирования физических процессов. Метод молекулярной динамики основан на численном решении уравнений движения Ньютона для систем микрочастиц (атомов, молекул). Такая классическая задача многих тел может быть решена только методами численного интегрирования, поэтому МД моделирование является развивающейся областью приложения методов численного моделирования.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины является: изучение основ метода молекулярно-динамического моделирования и получение навыков применения свободнораспространяемого ПО для проведения молекулярно-динамического моделирования свойств веществ.

В процессе изучения студент должен усвоить следующие разделы курса:

- Получить представление об уравнениях движения описывающих поведение атомных ансамблей и методах численного решения динамических уравнений;
- Получить представление о методах расчёта термодинамических параметров состояния вещества по динамическим средним решений уравнений движения.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Для изучения дисциплины необходимы компетенции, сформированные у обучающихся в результате освоения следующих дисциплин:

Математика: обыкновенные дифференциальные уравнения; Математика: математический анализ; Математика: теория функций комплексного переменного; Математика: векторный и тензорный анализ; Физика: механика, молекулярная физика и основы статистической термодинамики ; Уравнения математической физики; Теоретическая физика: Статистическая физика.

Освоение данной дисциплины необходимо при выполнении:

Учебно-исследовательская работа;

Научно-исследовательская работа;

Производственная (в том числе) преддипломная практика

Знания материалов по этой дисциплине необходимы при выполнении выпускной квалификационной работы, а также при практической работе выпускников по специальности.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
экспертно-аналитический			
участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в области быстропротекающих процессов	модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области физики быстропротекающих процессов, в том числе в области экстремальных состояний вещества, в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства	ПК-13.2 [1] - Способен к разработке математических моделей и проведению компьютерному моделированию экстремального состояния вещества и быстропротекающих процессов <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	З-ПК-13.2[1] - Знать основные методы и принципы научных исследований, физико-математического моделирования, основные проблемы профессиональной области, требующие использования современных научных методов исследования и использования современных программных комплексов; У-ПК-13.2[1] - Уметь ставить и решать прикладные исследовательские задачи; оценивать результаты исследований; формулировать результаты проведенного моделирования, проводить научные исследования и получать новые научные и прикладные результаты; В-ПК-13.2[1] - Владеть навыками выбора и использования методов компьютерного моделирования физических объектов и

			быстропротекающих процессов, методами анализа и синтеза научной информации
научно-исследовательский			
выбор методов и подходов к решению поставленной научной проблемы, формулировка математической модели явления, аналитические и численные расчеты	модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства	ПК-2 [1] - Способен выбирать и применять необходимое оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 25.035, 40.011	З-ПК-2[1] - Знать современное оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области. ; У-ПК-2[1] - Уметь критически оценивать, выбирать оборудования, инструментов и методов исследований в избранной предметной области ; В-ПК-2[1] - Владеть навыками выбора и применения оборудования, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области.
производственно-технологический			
квалифицированное использование исходных данных, материалов, оборудования, методов математического и физического моделирования производственно-технологических процессов и характеристик наукоемких технических устройств и объектов, включая использование алгоритмов и программ расчета их	модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области суперкомпьютерного моделирования инженерно-физических процессов в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства	ПК-9 [1] - Способен к математическому и компьютерному моделированию объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 06.001, 40.011	З-ПК-9[1] - Знать основные методы и принципы математического и компьютерного моделирования объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области, методы построения математических моделей типовых профессиональных задач, способы нахождения решений математических моделей и содержательной интерпретации

параметров			полученных результатов. ; У-ПК-9[1] - Уметь использовать математическое и компьютерное моделирования для описания свойств и характеристик объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области, профессионально интерпретировать смысл полученного результата.; В-ПК-9[1] - Владеть методами математического и компьютерного моделирования объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области и содержательной интерпретации полученных результатов.
------------	--	--	---

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование творческого инженерного/профессионального мышления, навыков организации коллективной проектной деятельности (В22)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для развития навыков коммуникации, командной работы и лидерства, творческого инженерного мышления, стремления следовать в профессиональной деятельности нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения, ответственности за принятые решения через подготовку групповых курсовых работ и

		практических заданий, решение кейсов, прохождение практик и подготовку ВКР. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для: - формирования производственного коллективизма в ходе совместного решения как модельных, так и практических задач, а также путем подкрепление рационально-технологических навыков взаимодействия в проектной деятельности эмоциональным эффектом успешного взаимодействия, ощущением роста общей эффективности при распределении проектных задач в соответствии с сильными компетентностными и эмоциональными свойствами членов проектной группы.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование культуры решения изобретательских задач (В37)	1. Использование воспитательного потенциала дисциплин "Информатика (Основы программирования)", Программирование (Объектно-ориентированное программирование)", "Программирование (Алгоритмы и структуры данных)" для формирования культуры написания и оформления программ, а также привития навыков командной работы за счет использования систем управления проектами и контроля версий. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплины "Проектная практика" для формирования культуры решения изобретательских задач, развития логического мышления, путем погружения студентов в научную и инновационную деятельность института и вовлечения в проектную работу.

		3.Использование воспитательного потенциала профильных дисциплин для формирования навыков цифровой гигиены, а также системности и гибкости мышления, посредством изучения методологических и технологических основ обеспечения информационной безопасности и кибербезопасности при выполнении и защите результатов учебных заданий и лабораторных работ по криптографическим методам защиты информации в компьютерных системах и сетях. 4.Использование воспитательного потенциала дисциплин "Информатика (Основы программирования)", Программирование (Объектно-ориентированное программирование)", "Программирование (Алгоритмы и структуры данных)" для формирования культуры безопасного программирования посредством тематического акцентирования в содержании дисциплин и учебных заданий. 5.Использование воспитательного потенциала дисциплины "Проектная практика" для формирования системного подхода по обеспечению информационной безопасности и кибербезопасности в различных сферах деятельности посредством исследования и перенятия опыта постановки и решения научно-практических задач организациями-партнерами.
--	--	--

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>8 Семестр</i>						
1	Первый раздел	1-8	16/16/0		25	Зд-8	3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2, 3-ПК-9, У-ПК-9, В-ПК-9, 3-ПК-13.2, У-ПК-13.2, В-ПК-13.2
2	Второй раздел	9-15	8/8/0		25	Зд-15	3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2, 3-ПК-9, У-ПК-9, В-ПК-9, 3-ПК-13.2, У-ПК-13.2, В-ПК-13.2
	<i>Итого за 8 Семестр</i>		22/22/0		50		
	Контрольные мероприятия за 8 Семестр				50	3	3-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2, 3-ПК-9, У-ПК-9, В-ПК-9, 3-ПК-13.2, У-ПК-13.2, В-ПК-13.2

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
Зд	Задание (задача)
З	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>8 Семестр</i>	22	22	0
1-8	Первый раздел	16	16	0
1 - 3	Основы молекулярно-кинетической теории вещества Кинетическая теория идеального газа. Давление, внутренняя энергия, температура. Характерные размеры атомов и молекул, длина свободного пробега атомов и частота столкновений. Вязкость, диффузия, теплопроводность газов.	Всего аудиторных часов		
		6	6	0
		Онлайн		
		0	0	0
4 - 5	Понятие о межатомных и межмолекулярных силах. Уравнение состояния реального газа. Потенциальные функции межмолекулярного взаимодействия. Характерные потенциалы межатомного и межмолекулярного взаимодействия.	Всего аудиторных часов		
		4	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
6 - 8	Понятие о методе молекулярной динамики и области её применения Общая характеристика метода молекулярной динамики, места и роли данного метода в современной науке и в технических приложениях. Современное ПО для МД-моделирования. Вспомогательное ПО для визуализации результатов.	Всего аудиторных часов		
		6	6	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	Второй раздел	8	8	0
9 - 11	Методы молекулярно-динамического моделирования МД моделирование свойств веществ и материалов. Базовые понятия метода молекулярной динамики. Уравнения движения. Расчётная МД ячейка. Периодические граничные условия. Единицы измерения и обезразмеривание уравнений движения при МД моделировании.	Всего аудиторных часов		
		4	4	0
		Онлайн		
		0	0	0
12 - 13	Описание межатомных взаимодействий с помощью межатомных потенциалов Проблема межатомных потенциалов. Природа межатомных и межмолекулярных сил. Приближения Борна-Опенгеймера для описания межатомных взаимодействий. Двухчастичные и многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия. Методы определения параметров межатомные потенциалов. Потенциалы для описания свойств металлов. Модель погружённого атома Многочастичные потенциалы для описания ковалентных связей. Потенциал Терзофора и Стиллинжера-Вебера. Ограничения подхода, основанного на модели межатомных потенциалов для описания межатомных взаимодействий.	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0
14 - 15	Молекулярно-динамическое моделирование МД моделирование для ансамблей частиц с постоянной температурой и постоянным давлением. Вычисление средних характеристик по результатам МД моделирования. Понятие о фазовых переменных и фазовом пространстве. Эргодическая гипотеза. Методы оптимизации численного решения МД уравнений. Обрезание межатомного потенциала. Списки ближайших	Всего аудиторных часов		
		2	2	0
		Онлайн		
		0	0	0

	соседей. Выбор оптимальных численных схем и шага интегрирования. Параллельные МД коды.			
--	--	--	--	--

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы учебной дисциплины используются образовательные технологии в форме лекций и практических занятия. При проведении работ и проверке самостоятельной работы студентов используются активные формы проведения занятий: совместный поиск решения задачи и компьютерного моделирования поставленной задачи, разбор конкретных ситуаций. Самостоятельная работа студентов подразумевает под собой проработку лекционного материала с использованием рекомендуемой литературы для подготовки к промежуточной аттестации по дисциплине.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-13.2	З-ПК-13.2	3, Зд-8, Зд-15
	У-ПК-13.2	3, Зд-8, Зд-15
	В-ПК-13.2	3, Зд-8, Зд-15
ПК-2	З-ПК-2	3, Зд-8, Зд-15
	У-ПК-2	3, Зд-8, Зд-15
	В-ПК-2	3, Зд-8, Зд-15
ПК-9	З-ПК-9	3, Зд-8, Зд-15
	У-ПК-9	3, Зд-8, Зд-15
	В-ПК-9	3, Зд-8, Зд-15

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – <i>«отлично»</i>	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69		E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64	3 – <i>«удовлетворительно»</i>		
Ниже 60	2 – <i>«неудовлетворительно»</i>	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ K23 Molecular dynamics in multiscale modeling : textbook, Maslov M.M., Katin K.P., Moscow: NRNU MEPhI, 2015
2. ЭИ П 27 Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов, Колдобский Г. И., Первалов В. П., Москва: Юрайт, 2023
3. ЭИ Ф 80 Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы : учебное пособие, Фортон В. Е., Москва: Физматлит, 2012

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 539.1 К20 Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий : , Каплан И.Г., М.: Наука, 1982
2. 530 Ф87 Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям : , Френкель Д., Смит Б., Москва: Научный мир, 2013
3. ЭИ Б 12 Физика: геометрия пространства-времени и классическая механика : учебное пособие для вузов, Бабецкий В. И., Мусин Ю. Р., Москва: Юрайт, 2023

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

Изучение разделов дисциплины, выполнение практических заданий, подготовка к контрольным мероприятиям включает в себя две части: теоретическую и прикладную – непосредственное решение задачи.

В ходе лекционных занятий рекомендуется вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.

Теоретическая часть предполагает проработку разделов курса, относящихся к лабораторной или курсовой работе. Необходимо определить раздел курса выполняемой работы, уяснить основные понятия, ознакомиться с решениями типовых задач и использовать их при решении задач. После этого следует приступить к решению задания.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов реализуется посредством работы с рекомендованной литературой (указана в Списке литературы в Рабочей Программе Учебной Дисциплины).

Своевременное и качественное выполнение самостоятельной работы базируется на соблюдении настоящих рекомендаций и изучении рекомендованной литературы. Студентам

рекомендуется получить в Библиотечно-информационном центре университета учебную литературу по дисциплине, необходимую для эффективной работы на всех видах аудиторных занятий, а также для самостоятельной работы по изучению дисциплины. Студент может дополнить список использованной литературы современными источниками, не представленными в списке рекомендованной литературы, и в дальнейшем использовать собственные подготовленные учебные материалы при подготовке курсовых работ и выполнении научно-исследовательской работы.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Для лучшего усвоения материала студентами каждую лекцию следует начинать с напоминания предыдущей лекции (можно в виде вопросов) и пояснения ее связи с предстоящей. Также завершать лекцию следует подведением ее краткого итога с указанием темы следующей лекции и ее связи с прошедшей.

На протяжении лекции полезно поддерживать интерактивность между лектором и студентами в виде вопросов в аудиторию. Важно задавать вопросы на знание материала из прошедших лекций или других курсов по мере обращения к нему или, по крайней мере, проговаривать их связь. Этим самым студенты могут почувствовать связь между различными навыками и их востребованность. Также важно постоянно задавать вопросы, озадачивающие студентов поднимаемой проблемой в рамках обсуждаемой темы (даже если она совсем частного характера), стимулируя внимание и творческое участие студента в ходе рассуждений лектора.

Важно разъяснять происхождение вводимых терминов.

Автор(ы):

Селезнев Александр Аркадьевич