Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Сибирский государственный индустриальный университет»

Кафедра прикладной математики и информатики

УТВЕРЖДАЮ
Директор института
информационных технологий и
автоматизированных систем
_____ А.В. Зимин
подпись
«____» _____ 20___ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы многомасштабного моделирования

01.03.02 «Прикладная математика и информатика»
(направленность (профиль): «Математическое моделирование и интеллектуальный анализ данных»)

Квалификация выпускника
Бакалавр

Форма обучения
Очная форма

Срок обучения: 4 года

Год начала подготовки 2025

Новокузнецк
2025

СибГИУ
Подлинник электронного документа хранится в системе электронного согласования документов СибГИУ
ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭП
Сертификат: daba56d7b892efca3bf5c04ed0251c98b19b099c
Владелец: Директор ИИТиАС Зимин Алексей Валерьевич
Действителен: с 15 января 2025 г. по 10 апреля 2026 г.
Дата и время: 22-04-2025 14:41:38 ПРОВЕРИТЬ ПОДПИСЬ

1 Цели и задачи освоения учебной дисциплины

Целями учебной дисциплины являются:

– приобретение теоретических знаний и практических навыков в области многомасштабного моделирования с применением компьютерных технологий.

Задачами учебной дисциплины являются:

– овладение методами и приёмами математического и компьютерного моделирования, включающего построение и анализ математической модели, разработку вычислительных алгоритмов для компьютерной реализации модели, проведение вычислительного эксперимента;

– совершенствование навыков работы с современным программным обеспечением, необходимым для эффективного решения задач в области многомасштабного моделирования.

2 Место учебной дисциплины в структуре ООП по направлению подготовки (специальности)

Учебная дисциплина относится к учебным дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений **Блока 1 «Дисциплины (модули)»** ООП по направлению подготовки (специальности) 01.03.02 «Прикладная математика и информатика».

Учебная дисциплина базируется на предварительном усвоении обучающимися учебных дисциплин:

– Математика;
– Информатика;
– Теория вероятностей и математическая статистика;
– Физика;
– Уравнения математической физики;
– Программирование;
– Численные методы решения инженерных задач.

Учебная дисциплина дополняет знания и умения, получаемые по одновременно изучаемым и последующим учебным дисциплинам:

– Математическое моделирование;
– Научно-исследовательская работа.

3 Планируемые результаты обучения по учебной дисциплине

Процесс изучения учебной дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

– Профессиональные компетенции

Наименование категории (группы) ПК	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Планируемые результаты обучения

	ПК-2: Способен проводить аналитические исследования с применением технологии больших данных в соответствии с требованиями заказчика	ПК-2.1 Выбирает методы и инструментальные средства анализа больших данных для проведения аналитических работ	– знать: основные методы многомасштабного моделирования и их интеграцию с методами анализа больших данных . – уметь: применять инструментальные программные средства для решения задач, использующих многомасштабные данные.
		ПК-2.2 Разрабатывает математические модели, выполняет поверку и оценку используемых моделей	– знать: основные математические модели, применяемые для описания многомасштабных объектов и систем . – уметь: разрабатывать математическую модель исследуемого многомасштабного объекта или системы .

4 Объем и содержание учебной дисциплины

Учебные занятия по учебной дисциплине проводятся в форме контактной работы и в форме самостоятельной работы обучающихся.

Контактная работа включает в себя занятия лекционного типа (лекции), занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы), промежуточную аттестацию обучающихся и иные формы взаимодействия обучающихся с педагогическими работниками и (или) лицами, привлекаемыми к реализации ООП на иных условиях, в том числе при проведении промежуточной аттестации обучающихся. Контактная работа может проводиться с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий.

Объем учебной дисциплины

Семестр / курс		***ИТОГО***	***5 семестр***	***6 семестр***
Форма промежуточной аттестации			*экзамен*	*экзамен*
Трудоёмкость	*академ. час.*	***288***	*108*	*180*
	зачетных единиц	***8***	*3*	*5*
Лекции, *академ. час.*		***48***	*16*	*32*
в форме практической подготовки		***0***	*0*	*0*
Лабораторные работы, *академ. час.*		***0***	*0*	*0*
в форме практической подготовки		***0***	*0*	*0*
Практические занятия, *академ. час.*		***64***	*16*	*48*

в форме практической подготовки	***0***	*0*	*0*
Курсовая работа / проект, *академ. час.*	***0***	*0*	*0*
в форме практической подготовки	***0***	*0*	*0*
Консультации, *академ. час.*	***0***	*0*	*0*
в форме практической подготовки	***0***	*0*	*0*
Самостоятельная работа, *академ. час.*	***131***	*49*	*82*
в форме практической подготовки	***0***	*0*	*0*
Контроль, *академ. час.*	***45***	*27*	*18*
в форме практической подготовки	***0***	*0*	*0*

Содержание учебной дисциплины

Раздел 1 Концепция многомасштабного моделирования;

Тема 1.1 Введение в проблематику многомасштабного моделирования (Физическая реальность как "непрерывное поле". Подходы при построении физико-математических моделей. "Многомасштабная" научная проблема. Категории многомасштабных методов.);

Тема 1.2 Адаптация модельно-ориентированного подхода к многомасштабной парадигме моделирования (Особенность модельно-ориентированного подхода. Понятие базовой композиции со структурой одного вида. Особенности решения задач многомасштабного моделирования.);

Тема 1.3 Концептуальное описание основных положений информационной технологии многомасштабного моделирования (Статические и динамические методы обработки данных. Базовые модели-композиции. Многомасштабная композиция.);

Раздел 2 Модели уровня молекулярно-динамического моделирования;

Тема 2.1 Математические методы описания систем взаимодействующих частиц (Общие понятия о методах математического описания систем взаимодействующих частиц. Неэмпирические (квантово-механические) методы. Полуэмпирические методы. Эмпирические методы. Методы Монте-Карло.);

Тема 2.2 Основы метода молекулярной динамики (История развития метода молекулярной динамики. Реализация метода молекулярной динамики. Моделирование различных термодинамических ансамблей.);

Тема 2.3 Энергия межатомного взаимодействия в кристалле (Статическая и тепловая энергия в кристалле. Эмпирические критерии энергии межатомного взаимодействия. Метод минимизации энергии.);

Тема 2.4 Потенциалы межчастичного взаимодействия (Виды потенциалов. Парные потенциалы. Многочастичные потенциалы. Кулоновское взаимодействие.);

Раздел 3 Простейшие модели квантовой механики;

Тема 3.1 Математический аппарат квантовой механики (Возникновение квантовой теории (от Планка до Шредингера). Функция и оператор Гамильтона. Собственные функции и собственные значения операторов. Простые задачи квантовой механики.);

Тема 3.2 Задачи квантовой механики, допускающие аналитическое решение (Атом водорода. Разделение переменных. Радиальная и шаровая функции. Задачи Штурма – Лиувиля. Главные квантовые числа.);

Раздел 4 Многоэлектронные модели;

Тема 4.1 Многоэлектронные задачи (Атом гелия. Детерминант Слэтера. Обменная энергия);

Тема 4.2 Вариационные методы (Метод Хартри – Фока. Метод Селянина);

Тема 4.3 Электронная структура системы многих тел (Теория Томаса – Ферми);

Тема 4.4 Локальный эффективный внешний потенциал (Численное решение уравнения Кона–Шема);

Тема 4.5 Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности (Пакет «Quantum ESPRESSO»);

Тема 4.6 Программные пакеты теории функционала плотности (Пакеты «Атом» и «Молекула»).

5 Перечень тем лекций

№ раздела / темы дисциплины	Темы лекций	Трудоемкость, *академ.час*	
		всего	**в форме практической подготовки**
Раздел 1.	Концепция многомасштабного моделирования		
Тема 1.1; Тема 1.2; Тема 1.3.	Введение в проблематику многомасштабного моделирования. Адаптация модельно-ориентированного подхода к многомасштабной парадигме моделирования. Концептуальное описание основных положений информационной технологии многомасштабного моделирования.	2	
Раздел 2.	Модели уровня молекулярно-динамического моделирования		
Тема 2.1.	Математические методы	2	

	описания систем взаимодействующих частиц		
Тема 2.2.	Основы метода молекулярной динамики	4	
Тема 2.3.	Энергия межатомного взаимодействия в кристалле	4	
Тема 2.4.	Потенциалы межчастичного взаимодействия	4	
Раздел 3.	Простейшие модели квантовой механики		
Тема 3.1.	Математический аппарат квантовой механики	4	
Тема 3.2.	Задачи квантовой механики, допускающие аналитическое решение	4	
Раздел 4.	Многоэлектронные модели		
Тема 4.1.	Многоэлектронные задачи	4	
Тема 4.2.	Вариационные методы	4	
Тема 4.3.	Электронная структура системы многих тел	4	
Тема 4.4.	Локальный эффективный внешний потенциал	4	
Тема 4.5.	Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности	4	
Тема 4.6.	Программные пакеты теории функционала плотности	4	
Итого:		**48**	**0**

6 Перечень тем практических занятий (семинаров)

№ раздела / темы дисциплины	**Темы практических занятий (семинаров)**	**Трудоемкость, *академ.час***	
		всего	**в форме практической подготовки**
Раздел 1.	Концепция многомасштабного моделирования		
Тема 1.1; Тема 1.2; Тема 1.3.	Введение в многомасштабное моделирование	2	
Раздел 2.	Модели уровня молекулярно-динамического моделирования		
Тема 2.1.	Математические методы описания систем	2	

	взаимодействующих частиц		
Тема 2.2.	Основы метода молекулярной динамики	4	
Тема 2.3.	Энергия межатомного взаимодействия в кристалле	4	
Тема 2.4.	Потенциалы межчастичного взаимодействия	4	
Раздел 3.	Простейшие модели квантовой механики		
Тема 3.1.	Примеры и свойства операторов квантовой механики. Задачи о потенциальной яме и потенциальном барьере.	4	
Тема 3.2.	Полиномы Лежандра и Лагера и графики для различных параметров. Энергия электрона.	4	
Раздел 4.	Многоэлектронные модели		
Тема 4.1.	Спин-орбитальное взаимодействие в атоме гелия.	4	
Тема 4.2.	Вариационная производная. Метод фазового поля.	6	
Тема 4.3.	Численные методы решения краевой задачи нелинейного уравнения Пуассона.	6	
Тема 4.4.	Численное решение уравнения Кона-Шема.	8	
Тема 4.5.	Основы работы в пакете Quantum ESPRESSO	8	
Тема 4.6.	Алгоритм работы программ "Атом" и "Молекула"	8	
Итого:		**64**	**0**

7 Перечень тем лабораторных работ

№ раздела / темы дисциплины	**Темы лабораторных работ**	**Трудоемкость, *академ.час***	
		всего	**в форме практической подготовки**
	Отсутствуют		
Итого:		**0**	**0**

8 Перечень тем курсовых работ (проектов)

№ раздела / темы	**Темы курсовых работ**	**Трудоемкость, *академ.час***

дисциплины	(проектов)	всего	в форме практической подготовки
	Отсутствуют		
Итого:		**0**	**0**

9 Виды самостоятельной работы

№ раздела / темы дисциплины	Виды самостоятельной работы	Трудоемкость, *академ.час*	
		всего	в форме практической подготовки
Раздел 1.	1. Изучение лекционного материала; 2. Подготовка к практическому занятию; 3. Прохождение тестирования.	9	
Раздел 2.	1. Изучение лекционного материала; 2. Подготовка к практическому занятию; 3. Прохождение тестирования.	40	
Раздел 3.	1. Изучение лекционного материала; 2. Подготовка к практическому занятию; 3. Прохождение тестирования.	22	
Раздел 4.	1. Изучение лекционного материала; 2. Подготовка к практическому занятию; 3. Прохождение тестирования.	60	
Контроль	*Подготовка к экзамену (5 семестр)*	27	
Контроль	*Подготовка к экзамену (6 семестр)*	18	
Итого:		**176**	**0**

10 Матрица компетентностных задач по учебной дисциплине

Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Контролируемые компетенции	Оценочные средства
Раздел 1.	ПК-2	1. Вопросы для устного обсуждения (опроса); 2. Наблюдение за работой на практическом занятии; 3. Оценка участия в работе на

		лекционном занятии; 4. Тестовые задания
Раздел 2.	ПК-2	1. Вопросы для устного обсуждения (опроса); 2. Наблюдение за работой на практическом занятии; 3. Оценка участия в работе на лекционном занятии; 4. Тестовые задания
Раздел 3.	ПК-2	1. Вопросы для устного обсуждения (опроса); 2. Наблюдение за работой на практическом занятии; 3. Оценка участия в работе на лекционном занятии; 4. Тестовые задания
Раздел 4.	ПК-2	1. Вопросы для устного обсуждения (опроса); 2. Наблюдение за работой на практическом занятии; 3. Оценка участия в работе на лекционном занятии; 4. Тестовые задания
Экзамен (5 семестр).	ПК-2	1. Вопросы к экзамену
Экзамен (6 семестр).	ПК-2	1. Вопросы к экзамену

11 Входной контроль

11.1 Цель входного контроля − определить начальный уровень подготовленности обучающихся и выстроить индивидуальную траекторию обучения. В условиях личностно-ориентированной образовательной среды результаты входного оценивания обучающегося используются как начальные значения в индивидуальном профиле академической успешности обучающегося.

11.2 Описание оценочных средств

Форма проведения входного контроля – тестирование.

Длительность тестирования – 20 минут.

Тестирование проводится в течение первых двух недель изучения учебной дисциплины в СУО «Moodle».

Для проведения тестирования используются тестовые задания для входного контроля (для ответа на 1 вопрос, как правило, выделяется 1 минута).

Шкала оценивания результатов тестирования

За каждый правильный ответ выставляется 1 балл. Оценка выставляется в зависимости от процента правильных ответов:

Оценка формируется в соответствии с критериями таблицы:

Процент результативности (правильных ответов)	Оценка
86 до 100	«отлично»
от 67до 85	«хорошо»
от 50 до 66	«удовлетворительно»
менее 50	«неудовлетворительно»

Основываясь на результатах тестирования, формируется индивидуальная траектория обучающегося (группы обучающихся), исходя из следующих соображений:

– 86 – 100 % – обучающийся готов к изучению учебной дисциплины без дополнительного повторения изученного ранее материала;

– 50 – 67 % – обучающийся в целом готов к изучению учебной дисциплины, требуется повторение отдельных вопросов(тем) изученного ранее материала, необходимого для успешного освоения учебной дисциплины;

– 49% и менее – обучающийся имеет слабую подготовку к изучению учебной дисциплины, необходимы корректирующие занятия и консультации.

Тестовые задания для входного контроля знаний обучающихся приведены в приложении.

12 Текущий контроль

12.1 Текущий контроль знаний используется для оперативного и регулярного управления учебной деятельностью (в том числе самостоятельной) обучающихся. Данный вид контроля стимулирует у обучающихся стремление к систематической самостоятельной работе по изучению учебной дисциплины и позволяет оценить степень освоения изученного материала.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в течение семестра, в ходе повседневной учебной работы по индивидуальной инициативе педагогического работника, в том числе посредством использования СУО «Moodle».

Формы проведения текущего контроля – вопросы для устного обсуждения (опроса); наблюдение за работой на практическом занятии; оценка участия в работе на лекционном занятии; тестовые задания.

12.2 Описание оценочных средств

Шкалы оценивания (методики оценки)

12.2.1 Рекомендации по оцениванию устных ответов обучающихся

С целью контроля и подготовки обучающихся к изучению новой темы в начале занятия лекционного типа (лекции) педагогическим работником проводится индивидуальный или фронтальный устный опрос по выполненным заданиям предыдущего раздела (темы).

Критерии оценки:

– правильность ответа по содержанию задания (учитывается количество и характер ошибок при ответе);

– полнота и глубина ответа (учитывается количество усвоенных фактов, понятий и т.п.);

– сознательность ответа (учитывается понимание излагаемого материала);

– логика изложения материала (учитывается умение строить целостный, последовательный рассказ, грамотно пользоваться специальной терминологией);

– рациональность использованных приемов и способов решения поставленной учебной задачи (учитывается умение использовать наиболее прогрессивные и эффективные способы достижения цели);

– своевременность и эффективность использования наглядных пособий и технических средств при ответе (учитывается умение грамотно и с пользой применять наглядность и демонстрационный опыт при устном ответе);

– использование дополнительного материала (обязательное условие);

– рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость выполнения задания, устного ответа во времени).

Оценка «отлично» ставится, если обучающийся:

– полно и аргументировано отвечает по содержанию задания;

– обнаруживает понимание материала, может обосновать свои суждения, применить знания на практике, привести необходимые примеры, в том числе самостоятельно составленные;

– излагает материал последовательно и правильно.

Оценка «хорошо» ставится, если обучающийся дает ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для оценки «отлично», но допускает 1 – 2 ошибки, которые сам же исправляет.

Оценка «удовлетворительно» ставится, если обучающийся обнаруживает знание и понимание основных положений данного задания, но:

– излагает материал неполно и допускает неточности в определении понятий или формулировке правил;

– не умеет достаточно глубоко и доказательно обосновать свои суждения и привести свои примеры;

– излагает материал непоследовательно и допускает ошибки.

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если обучающийся обнаруживает незнание ответа на соответствующее задание, допускает ошибки в формулировке определений и правил, искажающие их смысл, беспорядочно и неуверенно излагает материал. Оценка «неудовлетворительно» отмечает такие недостатки в подготовке обучающегося, которые являются серьезным препятствием к успешному освоению последующего материала.

12.2.2 Рекомендации по оцениванию результатов тестирования обучающихся

Тестирование проводится по изученным разделам (темам) учебной дисциплины для выявления уровня знаний и умений обучающегося, мотивирования обучающегося к активизации самостоятельной работы по усвоению учебного материала, выявления и устранения пробелов в знаниях, повышения дисциплины и организации учебной деятельности обучающегося.

Тестирование проводится в СУО «Moodle» в рамках часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся. Для тестирования используется 20 вопросов из базы типовых тестовых заданий по изученным разделам (темам) учебной дисциплины. Обучающийся выбирает один ответ из предложенных вариантов ответа. В случае выбора неправильного ответа обучающийся получает за данный вопрос 0 баллов; в случае правильного ответа – 1 балл.

Оценка формируется в соответствии с критериями таблицы:

Максимальный балл	Проходной балл	Оценка
20	не менее 18	отлично
17	не менее 14	хорошо
13	не менее 10	удовлетворительно
9	–	неудовлетворительно

12.2.3 Рекомендации по оцениванию участия обучающихся в работе на лекционных занятиях

Формирование у обучающихся добросовестного и ответственного отношения к собственному профессиональному образованию проявляется в обязательном его присутствии на лекционном занятии.

На лекционных занятиях происходит формирование информационной компетентности обучающихся, в том числе способности фиксировать информацию с помощью конспектирования учебного материала. Преподаватель на лекционных занятиях акцентирует внимание обучающихся на том, как необходимо оформлять конспект лекций в тетради. По окончании лекционных занятий

преподаватель осуществляет проверку тетрадей обучающихся и оценивает их.

Критерии оценки участия обучающихся в работе на лекционных занятиях

Наименование параметра оценки	Максимальное количество баллов за одно лекционное занятие
Наличие у обучающихся добросовестного и ответственного отношения к собственному профессиональному образованию, выраженное в посещении лекций	0,5
Умение конспектировать учебный материал в тетради, в том числе: - материал изложен последовательно, четко и аккуратно - в конспекте имеются изученные темы, основные термины, схемы	0,5
Всего	1

Если по результатам оценки участия обучающийся в лекционных занятиях в среднем за семестр обучающийся набрал не менее 0,5 баллов, то ему выставляется оценка «зачтено», менее 0,5 баллов – «не зачтено».

12.2.4 Рекомендации по оцениванию в процессе наблюдения за работой на практическом занятии

Наблюдение за работой на практическом занятии – важнейший компонент контроля деятельности обучающихся и качества их обучения.

Критерии оценки в процессе наблюдения за работой на практическом занятии:

– самостоятельность выполнения задания и работы с методическими указаниями (учитывается работа в течение занятия, быстрота и способность нахождения в методических указаниях нужной информации);

– правильность выполнения работы (учитывается последовательность выполняемых действий, умение работать с инструментами и/или средствами вычислительной техники);

– рациональность использования времени, отведенного на задание (не одобряется затянутость выполнения работы с учетом индивидуальных особенностей обучающихся);

– активность обучающегося при выполнении практической работы (учитывается индивидуальная работа и работа в группе).

Критерии оценки по результатам наблюдения за работой на практическом занятии

Наименование параметра оценки	Максимальное количество баллов
Самостоятельно выполняет задания; умеет работать с методическими указаниями.	2,5
Указанные в методических указаниях действия выполняет в правильной последовательности; умеет работать с инструментами и/или средствами вычислительной техники.	1,25
Рационально использует время, отведенное на задание; проявляет активность при выполнении практической работы.	1,25
Итого	**5**

Максимальное количество – 5 баллов соответствует оценке «отлично», 4 балла – «хорошо», 3 балла – «удовлетворительно», 2 балла – «неудовлетворительно».

Задания и вопросы для текущего контроля знаний обучающихся по разделам (темам) учебной дисциплины приведены в приложении.

13 Промежуточная аттестация

13.1 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по учебной дисциплине предназначены для оценки степени достижения запланированных результатов обучения по завершению изучения учебной дисциплины в установленной учебным планом форме и позволяют определить качество усвоения изученного материала.

Итоговой формой контроля сформированности компетенций у обучающихся по учебной дисциплине является: экзамен (5 семестр); экзамен (6 семестр).

Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся включают: вопросы к экзамену.

13.2 Оценивание обучающегося на экзамене (5 семестр)

Оценка	Требования к знаниям
отлично	Оценка «отлично» выставляется обучающемуся, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал различной литературы, правильно обосновывает принятое нестандартное решение, обладает приемами выполнения практических задач по формированию компетенций.
хорошо	Оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если он

Оценка	Требования к знаниям
	твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, обладает необходимыми умениями и приемами их выполнения.
удовлетворительно	Оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, испытывает сложности при выполнении практических работ и затрудняется связать теорию вопроса с практикой.
неудовлетворительно	Оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части программного материала, неуверенно отвечает, допускает серьезные ошибки, не имеет представлений по методике выполнения практической работы. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится обучающимся, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по данной учебной дисциплине.

13.3 Оценивание обучающегося на экзамене (6 семестр)

Оценка	Требования к знаниям
отлично	Оценка «отлично» выставляется обучающемуся, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал различной литературы, правильно обосновывает принятое нестандартное решение, обладает приемами выполнения практических задач по формированию компетенций.
хорошо	Оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, обладает необходимыми умениями и приемами их выполнения.
удовлетворительно	Оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, испытывает сложности при выполнении практических работ и затрудняется связать теорию вопроса с практикой.
неудовлетворительно	Оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся, который не знает значительной части программного материала, неуверенно отвечает, допускает серьезные ошибки, не имеет представлений по методике выполнения практической работы. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится обучающимся, которые не

Оценка	Требования к знаниям
	могут продолжить обучение без дополнительных занятий по данной учебной дисциплине.

Задания и вопросы для промежуточной аттестации обучающихся приведены в приложении.

14 Учебно-методическое и информационное обеспечение учебной дисциплины

а) литература:

1 Абгарян, К.К. Методы многомасштабного моделирования в задачах цифрового материаловедения : Монография / К.К.Абгарян, А.А.Журавлев. - Москва : МАКС Пресс, 2022. - 120 с. - ISBN 978-5-317-06870-7. – URL: https://elibrary.ru/item.asp?id=53869551 (дата обращения: 16.04.2025);

2 Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. – URL: https://e.lanbook.com/book/210257 (дата обращения: 16.04.2025);

3 Клунникова, Ю. В. Моделирование физических процессов методом молекулярной динамики : учебное пособие / Ю. В. Клунникова, М. В. Аникеев. — Ростов-на-Дону : ЮФУ, 2021. — 91 с. — ISBN 978-5-9275-3919-2. – URL: https://e.lanbook.com/book/247049 (дата обращения: 16.04.2025);

4 Медведев, Н. Н. Молекулярная динамика : учебное пособие : в 2 частях / Н. Н. Медведев. — Новосибирск : НГУ, 2023 — Часть 1 : Получение моделей — 2023. — 114 с. — ISBN 978-5-4437-1331-1. – URL: https://e.lanbook.com/book/388289 (дата обращения: 16.04.2025);

5 Романова, К. А. Квантово-химическое моделирование физико-химических свойств химических соединений : учебное пособие / К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов. — Казань : КНИТУ, 2021. — 84 с. — ISBN 978-5-7882-3054-2. – URL: https://e.lanbook.com/book/330935 (дата обращения: 16.04.2025);

6 Салеев, В. А. Квантовомеханическое моделирование свойств кристаллов в ab initio программных пакетах : учебное пособие / В. А. Салеев, А. В. Шипилова. — Самара : Самарский университет, 2023. — 100 с. — ISBN 978-5-7883-1942-1. – URL: https://e.lanbook.com/book/406769 (дата обращения: 16.04.2025).

б) ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1 Электронный каталог : сайт / Научно-техническая библиотека СибГИУ. – Новокузнецк, [199 –]. – URL: http://libr.sibsiu.ru. – URL: https://libr.sibsiu.ru;

2 Электронная библиотека // Научно-техническая библиотека СибГИУ : сайт. – Новокузнецк, [200 –]. – URL: http://library.sibsiu.ru/LibrELibraryFullText.asp. – Режим доступа: для авторизир. пользователей. – URL: https://library.sibsiu.ru/LibrELibraryFullText.asp;

3 Консультант студента : электронно-библиотечная система / ООО «КОНСУЛЬТАНТ СТУДЕНТА». – Москва, [200 –]. – URL: http://www.studentlibrary.ru. – Режим доступа: для авторизир. пользователей;

4 ЛАНЬ : электронно-библиотечная система : [коллекция «Единая профессиональная база знаний для технических вузов - Издательство Лань" ЭБС»] / ООО «Издательство ЛАНЬ». – Санкт-Петербург, [200 –]. – URL: http://e.lanbook.com. – Режим доступа: для авторизир. пользователей;

5 Образовательная платформа ЮРАЙТ / ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ». – Москва, [200 –]. – URL: https://urait.ru. – Режим доступа: для авторизир. пользователей;

6 Университетская библиотека онлайн : электронно-библиотечная система / ООО «Директ-Медиа». – Москва, [200 –]. – URL: https://biblioclub.ru. – Режим доступа: для авторизир. пользователей. – URL: http://www.biblioclub.ru;

7 Электронная библиотека УМЦ ЖДТ : [коллекция «Эксплуатация железных дорог»] / ФГБУ ДПО «Учебно-методический центр по образованию на железнодорожном транспорте». – Москва, [2013 –]. – URL: https://umczdt.ru/books/. – Режим доступа: для авторизир. пользователей;

8 НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА eLIBRARY.RU : база данных / ООО «НЭБ». – Москва, [200 –]. – URL: http://elibrary.ru. – Режим доступа: по подписке;

9 Электронные периодические издания ИВИС : универсальная база данных / ООО «ИВИС». – Москва, [200 –]. – URL: http://eivis.ru. – Режим доступа: по подписке.

в) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– 7-Zip;
– Adobe Acrobat Reader;
– Astra Linux Special Edition;
– Kaspersky Endpoint Security;
– Microsoft Office;
– Microsoft Windows;
– OnlyOffice;
– PyCharm;
– Р7-Офис.

г) базы данных и информационно-справочные системы:

1 ГАРАНТ : справочно-правовая система / ООО «Правовой центр «Гарант». – Кемерово, [200 –]. – Режим доступа: компьютерная сеть Сиб. гос. индустр. ун-та.;

2 КонсультантПлюс : справочно-правовая система / ООО «Информационный центр АНВИК». – Новокузнецк, [199 –]. – Режим доступа: компьютерная сеть библиотеки Сиб. гос. индустр. ун-та.;

3 Техэксперт : информационно-справочная система / ООО «Группа компаний «Кодекс». – Кемерово, [200 –]. – Режим доступа: компьютерная сеть Сиб. гос. индустр. ун-та.

15 Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает учебные аудитории, оснащенные оборудованием, компьютерной техникой, и техническими средствами обучения, в том числе:

- учебную аудиторию для проведения занятий лекционного типа, оборудованную учебной доской, экраном и мультимедийным проектором;
- учебную аудиторию для проведения занятий семинарского типа (практических занятий), оснащенную персональными компьютерами;
- учебную аудиторию (помещения) для групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду, научно-техническую библиотеку СибГИУ.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) 01.03.02 «Прикладная математика и информатика».

Составитель(и):

доцент Сарычев Владимир Дмитриевич (кафедра прикладной математики и информатики);

профессор Маркидонов Артем Владимирович (кафедра прикладной математики и информатики).

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и утверждена на заседании кафедры.

Согласована:

зав. кафедрой информатики
и общетехнических дисциплин КГПИ КемГУ
к.пед.н., доцент  И.В. Сликишина

Приложение

Тестовые задания для входного контроля знаний обучающихся

Выберите один правильный ответ.

1 Итерация – это …
а) результат повторного применения какой–либо математической операции;
б) замена одних математических объектов другими, в том или ином смысле близким к исходным;
в) число, изображаемое единицей и 18 нулями;
г) продолжение функции, принадлежащей заданному классу, за пределы ее области определения.

2 Какие погрешности могут нарастать в процессе вычислений?
а) погрешности округления;
б) погрешности вольтметра;
в) погрешности измерения;
г) погрешности нуля.

3 Вычислительный эксперимент – это технология исследования сложных процессов и явлений, основанная на … и их исследовании с помощью ЭВМ. Вставьте пропущенное:
а) описании физической модели;
б) построении математических моделей;
в) задании целевых функций;
г) выборе численных моделей.

4 С точки зрения вычислительного эксперимента к устранимым погрешностям относятся:
1) ошибки округления;
2) ошибка численного метода;
3) ошибки выбора или построения математической модели;
4) ошибки дискретизации.
Укажите неверные:
а) 1) и 3);
б) все устранимые;
в) 3);
г) 2).

5 Любой численный метод должен удовлетворять следующим требованиям:
1) устойчивость;
2) согласованность;
3) корректность;
4) сходимость;
5) легко реализуемость;

Укажите верный ответ:
а) 3), 5);
б) 1), 2), 4);
в) 1), 4), 5);
г) 1), 3), 4).

6 Задача называется …, если ее решение существует, единственно и устойчиво по исходным данным. Вставьте пропущенное:
а) устойчивой;
б) корректно поставленной;
в) сходящейся;
г) точной.

7 Метод называется ... по параметру x, если его решение y непрерывно зависит от x. Вставьте пропущенное:
а) устойчивым;
б) корректным;
в) сходящимся;
г) точным.

8 Метод является … , если полученное искомое решение близко к истинному. Вставьте пропущенное:
а) устойчивым;
б) корректным;
в) сходящимся;
г) точным.

9 Метод называется устойчивым по параметру x, если …
а) малым изменениям x соответствуют малые изменения решения;
б) малым изменениям x соответствуют большие изменения решения;
в) после нескольких итераций позволяет определить искомое решение;
г) позволяет определить искомое решение после первой итерации.

10 Задача называется корректно поставленной, если …
а) ее решение не существует;
б) если существует несколько ее решений;
в) ее решение существует и единственно;
г) ее решение существует, оно единственно и устойчиво по исходным данным.

11 Численный метод называется сходящимся, если…
а) полученное численное решение близко к истинному;
б) решение исходной математической задачи (модели) существует;
в) метод реализуется за конечное число шагов;
г) решение исходной математической задачи (модели) существует при определенных условиях.

12 Установить порядок следования перечисленных этапов вычислительного эксперимента:

1) выбор или построение математической модели;
2) программирование;
3) анализ объекта или явления;
4) выбор или построение численной (дискретной) модели;
5) счет и анализ результатов.

Укажите верный ответ:
а) 1), 2), 3), 4), 5);
б) 2), 3), 5), 1), 4);
в) 3), 4), 1), 2), 5);
г) 3), 1), 4), 2), 5).

13 На каком этапе вычислительного эксперимента записываются совокупности используемых формул, уравнений, ограничений для реализации на ЭВМ?
а) счет и анализ результатов;
б) анализ объекта или явления;
в) выбор или построение численной (дискретной) модели;
г) выбор или построение математической модели.

14 Погрешность, связанная с самой постановкой математической задачи, это …
а) погрешность задачи;
б) погрешность метода;
в) остаточная погрешность;
г) погрешность действия.

15 Метод, позволяющий получить корни системы с заданной точностью путем сходящихся бесконечных процессов, это …
а) итерационный метод;
б) точный метод;
в) приближенный метод;
г) относительный метод.

16 Методы решения уравнений делятся на:
а) прямые и итеративные;
б) прямые и косвенные;
в) начальные и конечные;
г) определенные и неопределенные.

17 Как называется процесс приближения корня уравнения к его точному значению?
а) интерполяция;
б) экстраполяция;
в) итерационный процесс;
г) аппроксимация.

18 Как называется свойство алгоритма, заключающееся в том, что каждое действие и алгоритм в целом должны иметь возможность завершения:
а) результативность;
б) конечность;
в) дискретность;
г) массовость.

19 Как называется свойство алгоритма, заключающееся в том, что алгоритм должен состоять из конкретных действий, следующих в определенном порядке:
а) массовость;
б) детерминированность;
в) дискретность;
г) результативность.

20 Как называется свойство алгоритма, заключающееся в отсутствие ошибок, алгоритм должен приводить к правильному результату для всех допустимых входных значениях:
а) результативность;
б) детерминированность;
в) массовость;
г) дискретность.

Задания и вопросы для текущего контроля знаний обучающихся по разделам (темам) учебной дисциплины

Раздел 1. Концепция многомасштабного моделирования.

1 Устный опрос на лекции

Перечень вопросов для устного опроса:

1 Что подразумевается под многомасштабным моделированием?

2 На какие категории можно разделить многомасштабные методы моделирования?

3 Что понимается под базовой моделью-композицией?

4 Что в многомасштабном моделировании понимается под композицией?

5 Что понимается под многомасштабной композицией?

6 Что такое «иерархия проведения твердотельных расчетов»?

7 Какие модели относятся к микроскопическому масштабному уровню?

8 Какие модели относятся к мезомасштабному уровню?

9 Какие модели относятся к макроскопическому масштабному уровню?

10 Что относится к прямым и обратным задачам в многомасштабном моделировании?

2 Тестирование по результатам освоения лекционного материала и самостоятельной работы

Тестирование проводится для определения степени усвоения материалов лекций, а также выполнения самостоятельной работы в рамках часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся, в СУО «Moodle».

Перечень вопросов для тестирования:

1. Укажите наиболее корректное определение термина «модель»:

а) упрощенное описание или воспроизведение изучаемого объекта;

б) копия изучаемого объекта с незначительными отличиями по отношению к оригиналу;

в) масштабная копия изучаемого объекта, выполненная в материальном виде или представленная в виде описания на математическом языке;

г) воображаемый объект, отражающий основные свойства оригинала.

2. Укажите основную цель создания моделей:

а) познание окружающего мира;

б) испытание новых технологий;

в) экономия времени и материальных ресурсов;

г) проверка научных гипотез.

3. Что представляет собой процесс моделирования?

а) процесс создания модели изучаемого явления и работа с ней;

б) вычислительный эксперимент с использованием компьютерной техники;

в) изучение созданной модели и прогноз ее поведения в разных условиях;

г) описание модели в виде алгоритма и компьютерной программы.

4. Термины «материальная модель» и «физическая модель»:

а) синонимы;

б) отличаются в некоторых деталях друг от друга;

в) существенно отличаются друг от друга;

г) принципиально отличаются друг от друга.

5. Информационные модели:

а) не имеют прямого материального воплощения;

б) иногда могут иметь материальное воплощение;

в) часто имеют материальное воплощение;

г) всегда имеют материальное воплощение.

6. К детерминированным моделям относится:

а) модель случайного блуждания частицы;

б) модель формирования очереди;

в) модель свободного падения тела в среде с сопротивлением;
г) модель игры «орел–решка».

7. К стохастическим моделям относится:
а) модель движения тела, брошенного под углом к горизонту;
б) модель броуновского движения;
в) модель таяния кусочка льда в стакане;
г) модель обтекания газом крыла самолета.

8. Компьютерный эксперимент – это:
а) решение задачи на компьютере;
б) исследование модели с помощью компьютерной программы;
в) подключение компьютера для обработки физических экспериментов;
г) автоматизированное управление физическим экспериментом.

9. Какие зависимые переменные существуют в моделях микроуровня?
а) время;
б) пространственные координаты;
в) плотность и масса;
г) фазовые координаты.

10. Какие зависимые переменные существуют в моделях макроуровня?
а) время и характеристики потока;
б) фазовые переменные типа потенциала;
в) пространственные координаты;
г) фазовые переменные типа потока.

3 Выполнение практических работ

Задания для практических работ, теоретический и методический материал для самостоятельного изучения и вопросы для собеседования представлены в методических указаниях к практическим занятиям.

Примеры заданий для выполнения практических работ:

Практическая работа «Введение в многомасштабное моделирование»

Установите библиотеку nglview. Используя методы demo(), show_structure_file(), add_cartoon() / remove_cartoon(), add_ball_and_stick() / remove_ball_and_stick(), clear_representations(), _display_repr() проведите исследование заданной pdb-структуры. Выполните выделение интересующего объекта и измените его цвет и другие параметры.

Раздел 2. Модели уровня молекулярно-динамического моделирования.

1 Устный опрос на лекции

Перечень вопросов для устного опроса:

1 В чем заключается суть адиабатического приближения Борна–Опенгеймера?

2 За счет чего увеличивается скорость расчета в полуэмпирических методах по сравнению с методами ab initio?

3 Какой подход применяется в методе молекулярной механики, кардинально отличающий его от расчетов «из первых принципов»?

4 Чем пренебрегают в методе молекулярной динамики, что позволяет использовать классические уравнения движения?

5 Каково условие перехода моделируемой системы в новое состояние при использовании алгоритма Метрополиса?

6 По каким путям шло развитие метода молекулярной динамики?

7 В чем главный недостаток метода молекулярной динамики?

8 Из каких компонентов состоит математическая модель, на которой базируется метод молекулярной динамики?

9 Какое эмпирическое правило применяется для определения оптимального значения временного шага?

10 Для чего вводятся граничные условия в методе молекулярной динамики? В каких случаях граничные условия при моделировании не требуются?

11 Какие характеристики частиц должны быть известны перед началом процедуры интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения?

12 Какие алгоритмы применяются в методе молекулярной динамики для численного интегрирования уравнений движения?

13 Какими способами могут быть ускорены вычисления при моделировании методом молекулярной динамики?

14 Что из макроскопических характеристик системы может быть вычислено методом молекулярной динамики?

15 Какие методы используются для моделирования различных термодинамических ансамблей?

16 Каков критерий устойчивости кристаллической структуры?

17 Из чего складывается внутренняя энергия кристалла?

18 Как определяется колебательная составляющая энергии кристалла?

19 Чем определяются колебательные и термодинамические характеристики кристалла?

20 Какой физический смысл имеет парциальная постоянная Грюнайзена?

21 Каков физический смысл энергии межатомного взаимодействия в металлическом кристалле?

22 Каков физический смысл энергии переноса заряда?

23 Как называется метод компьютерного моделирования, реализующий нахождение конфигурации атомной системы, соответствующей минимуму потенциальной энергии?
24 Чем определяются свойства материала с позиции статистической физики?
25 На каких расстояниях проявляется межмолекулярное взаимодействие?
26 Какой из методов компьютерного моделирования наиболее чувствителен к выбору потенциала межчастичного взаимодействия?
27 В чем разница между классическим и квантовомеханическим подходом к описанию межчастичного взаимодействия?
28 Какие компоненты входят в потенциал межчастичного взаимодействия?
29 Что такое эмпирический потенциал?
30 В чем суть моделей твердых и мягких сфер?
31 Каковы основные недостатки парных потенциалов?
32 Какие подходы применяются для описания многочастичных взаимодействий?
33 Что подразумевает проблема переносимости потенциала?
34 Какова суть гипотезы порядка связей?
35 В чем заключается модифицированный метод сильной связи?
36 В чем суть теории функционала электронной плотности?
37 Оценка каких сил и потенциалов требует наибольших вычислительных затрат?

2 Тестирование по результатам освоения лекционного материала и самостоятельной работы

Тестирование проводится для определения степени усвоения материалов лекций, а также выполнения самостоятельной работы в рамках часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся, в СУО «Moodle».

Перечень вопросов для тестирования:

1 Ограниченность использования методов молекулярной механики и молекулярной динамики обусловлено …

а) невозможностью сопоставления полученных результатов с реальным временем;

б) большими затратами вычислительных ресурсов;

в) малым числом частиц в моделируемой системе;

г) неоднозначностью потенциалов взаимодействия.

2 Основу метода молекулярной динамики составляет …

а) представление о совокупности материальных точек, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона;

б) генерация случайных чисел с помощью арифметических и логических операций;

в) моделирование систем, свойства которых определяются электронными эффектами типа орбитальных взаимодействий;
г) представление о природе действующих в молекуле сил.

3 Для метода молекулярной динамики справедливы следующие утверждения:
а) каждое последующее значение физической величины получается путем случайного отклонения от предыдущего;
б) при описании электронной подсистемы волновая функция заменяется электронной плотностью;
в) для каждой частицы моделируемой системы имеются данные о ее массе, радиус-векторе и скорости;
г) электронное распределение и дипольный момент не должны зависеть от поворота молекулы как целого в пространстве.

4 При использовании периодических граничных условий предполагается, что …
а) расчетную ячейку окружают пограничным слоем атомов, которые перемещаются в соответствии с теорией сплошных сред;
б) если один из атомов выходит за грань расчетной ячейки, с противоположной грани вводится точно такой же атом;
в) координаты граничных атомов расчетной ячейки фиксированы;
г) моделируется поверхность кристалла.

5 При использовании жестких граничных условий предполагается, что …
а) если один из атомов выходит за грань расчетной ячейки, с противоположной грани вводится точно такой же атом;
б) координаты граничных атомов расчетной ячейки фиксированы;
в) расчетную ячейку окружают пограничным слоем атомов, которые перемещаются в соответствии с теорией сплошных сред;
г) моделируется поверхность кристалла.

6 Какой способ НЕ применяется для ускорения вычислений в методе молекулярной динамики?
а) введение радиуса обрезания потенциала;
б) использование метода списка Верле;
в) конструирование двумерных расчетных ячеек;
г) использование метода масштабирования скоростей.

7 Какой метод НЕ применяется для численного интегрирования уравнений движения?
а) метод неопределенных коэффициентов;
б) скоростной метод Верле;
в) метод «чехарда»;
г) метод «предиктор-корректор».

8 При включении термостата Нозе–Гувера …

а) исследуемая система приводится в контакт с тепловым резервуаром путем введения знакопеременной силы трения;
б) группе выбранных частиц системы, которые взаимодействуют с тепловым резервуаром, придаются случайные импульсы;
в) используются дополнительные степени свободы, которые интегрированы в уравнения движения;
г) используются уравнения движения броуновской динамики.

9 При применении методов баростатирования …
а) вводятся искусственные координаты и импульсы частиц;
б) скорости выбранных частиц устанавливаются в соответствии с распределением Максвелла
в) движение частиц системы описывается уравнением Ланжевена
г) размеры расчетной ячейки автоматически изменяются.

10 Критерием нахождения устойчивого варианта кристаллической структуры является …
а) энергетический минимум ансамбля частиц;
б) оптимальная форма кристалла;
в) отсутствие кинетической энергии частиц;
г) расположение частиц на кратчайшем расстоянии друг от друга.

3 Выполнение практических работ

Задания для практических работ, теоретический и методический материал для самостоятельного изучения и вопросы для собеседования представлены в методических указаниях к практическим занятиям.

Примеры заданий для выполнения практических работ:

Практическая работа «Математические методы описания систем взаимодействующих частиц»

Разработайте программную компоненту для визуализации 3D кристалла с гранецентрированной кубической решеткой.

Практическая работа «Основы метода молекулярной динамики»

Разработайте программную компоненту для расчета сила взаимодействия атомов на границе в 3D кристалле для метода молекулярной динамики.

Разработайте программную компоненту для расчета кинетической энергии 3D кристалла Al.

Практическая работа «Энергия межатомного взаимодействия в кристалле»

Разработайте программную компоненту для расчета энергии дефекта в кристалле с точечными дефектами замещения.

Разработайте программную компоненту для расчета энергии для атомной плоскости гранецентрированной решетки Al с индексами Миллера [111].

Разработайте программную компоненту для диссипации энергии в кристалле.

Практическая работа «Потенциалы межчастичного взаимодействия»

Разработайте программную компоненту для построения графика зависимости потенциальной функции межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса в зависимости от расстояний между атомами:

$$\varphi(r) = -\frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^8} + Cr + D.$$

Раздел 3. Простейшие модели квантовой механики.

1 Устный опрос на лекции

Перечень вопросов для устного опроса:

1 В чём заключается ультрафиолетовая катастрофа. В каких случаях может отличаться суммирование от интегрирования?

2 Как можно записать гипотезу де Бройля, используя частоту и волновое число? Можно ли «вывести» уравнение Шредингера из дисперсионного уравнения?

3 Как провести соответствие между функцией и оператором Гамильтона? Собственные значения и собственные функции оператора?

4 Зачем нужно понятие спектра оператора? Чем отличается спектр электрона в потенциальной яме от спектра Бора?

5 Какую роль играет дисперсионное соотношение в периодическом барьере?

6 Перечислите задачи квантовой механике, которые допускаю аналитические решения.

7 Как объяснить, почему обрывается ряд Лагерра?

8 Как объяснить, почему обрывается ряд Лежандра?

9 Как доказать полноту шаровых функций?

10 Какой смысл имеет орбитальное квантовое число?

2 Тестирование по результатам освоения лекционного материала и самостоятельной работы

Тестирование проводится для определения степени усвоения материалов лекций, а также выполнения самостоятельной работы в рамках часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся, в СУО «Moodle».

Перечень вопросов для тестирования:

1. Из какого уравнения находятся энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в центрально-симметричном поле U(r) (L^2 – оператор квадрата момента импульса)?

а) $ih\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{h^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\psi(r),$

б) $\left(-\frac{h^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\psi(r) = E\psi(r),$

в) $\left(-h\nabla + U(r)\right)\psi(r) = E\psi(r),$

г) $\left(-\frac{h^2}{2m}L^2 + U(r)\right)\psi(r) = E\psi(r).$

2. Какой из четырех нижеследующих формул определяется оператор Гамильтона частицы в центрально-симметричном поле (L^2 – оператор квадрата момента импульса, L_z – оператор проекции момента на ось z)?

а) $-\frac{h^2}{2m}r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2mr^2}L^2 + U(r),$

б) $-\frac{h^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2mr^2}L^2 + U(r),$

в) $-\frac{h^2}{2m}r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2mr^2}L_z + U(r),$

г) $-\frac{h^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{2mr^2}L_z + U(r).$

3. Будет ли гамильтониан частицы, движущейся в центральном поле, коммутировать с оператором проекции момента на ось z?

а) да;

б) нет;

в) это зависит от поля;

г) это зависит от состояния, в котором находится частица.

4. Будет ли гамильтониан частицы, движущейся в центральном поле, коммутировать с оператором проекции момента на ось x?

а) да;

б) нет;

в) это зависит от поля;

г) это зависит от состояния, в котором находится частица.

5. Будет ли гамильтониан частицы, движущейся в центральном поле, коммутировать с оператором квадрата момента?

а) да;

б) нет;

в) это зависит от поля;

г) это зависит от состояния, в котором находится частица.

6. Что можно сказать о зависимости волновых функций стационарных состояний частицы от полярного ϑ и азимутального ϕ углов в некотором центрально-симметричном поле?

а) не зависят от углов ϑ и ϕ;

б) зависимость от углов ϑ и ϕ всегда сводится к некоторой сферической функции;

в) эти функции можно выбрать так, что их зависимость от углов ϑ и ϕ сводится к некоторой сферической функции;

г) это зависит от вида поля.

7. Что можно сказать об интеграле $\int_0^\infty \chi_1(r)\chi_2(r)dr$, где χ(*r*)=R(r)r – радиальные части волновых функций Ψ(*r*,ϑ,ϕ) стационарных состояний дискретного спектра (Ψ=R(r) Y lm(ϑ, ϕ))?

а) он равен нулю, если эти функции отвечают разным радиальным квантовым числам и разным моментам;

б) он равен нулю, если эти функции отвечают разным радиальным квантовым числам, но одинаковому моменту;

в) он равен нулю, если эти функции отвечают одинаковым радиальным квантовым числам, но разным моментам;

г) он равен нулю, если эти функции отвечают одинаковым радиальным квантовым числам и одинаковым моментам.

8. Что такое вырождение уровней энергии частицы в центрально симметричном поле по проекции момента?

а) совпадение проекций момента у состояний с разными энергиями;

б) совпадение проекций у состояний с разными моментами;

в) совпадение моментов у состояний с разными проекциями;

г) совпадение энергий у состояний с разными проекциями момента.

9. Что такое «вырождение по моменту» в центрально симметричном поле?

а) совпадение моментов у состояний с разными энергиями;

б) совпадение энергий у состояний с разными моментами;

в) совпадение моментов у состояний с разными проекциями;

г) совпадение проекций у состояний с разными моментами.

10. Что такое «случайное» вырождение уровней энергии в центрально-симметричном поле?

а) совпадение энергий у частиц, движущихся в разных потенциалах;

б) совпадение энергий у состояний с разными моментами;

в) случайное столкновение частиц, имеющих одинаковые энергии;

г) совпадение моментов у состояний с разными энергиями.

3 Выполнение практических работ

Задания для практических работ, теоретический и методический материал для самостоятельного изучения и вопросы для собеседования представлены в методических указаниях к практическим занятиям.

Примеры заданий для выполнения практических работ:

Практическая работа «Примеры и свойства операторов квантовой механики. Задачи о потенциальной яме и потенциальном барьере»

1.Решить стационарное уравнение Шредингера для прямоугольной потенциальной ямы и найти энергетический спектр

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\psi'' + U(x)\psi = -E\psi,\ U(x) = \begin{cases} -U_0,\ |x| \le a/2, \\ 0,\ |x| > a/2. \end{cases},$$

2.Найдите коэффициент прохождения частицы массой m_0 через треугольный потенциальный барьер вида

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2}\psi'' + U(x)\psi = -E\psi,\ U(x) = \begin{cases} 0, x \le 0, \\ U_0(1 - x/a),\ 0 < x < a, \\ 0, \quad x > a. \end{cases},$$

Практическая работа «Полиномы Лежандра и Лагера и графики для различных параметров. Энергия электрона.»

1.Представление решения уравнения Шредингера в кулоновском поле через радиальную и шаровую функции. Получить обыкновенные дифференциальные уравнения.

2.Радиальные волновые функции атома водорода выразить через обобщённые полиномы Лагерра и вывести рекуррентные соотношения для коэффициентов. Построить серию графиков для различных значений главного квантового числа.

3.Выразить шаровые волновые функции атома водорода через полиномы Лежандра и вывести рекуррентные соотношения для коэффициентов. Построить серию графиков для различных значений орбитального квантового числа.

Раздел 4. Многоэлектронные модели.

1 Устный опрос на лекции

Перечень вопросов для устного опроса:

1 Можно ли представить многоэлектронную волновую функцию через одноэлектронную функцию?

2 Дайте определение определителя матрицы, не прибегая к алгебраическим дополнениям?

3 Почему у определителя Слэтера стоит множитель 1/N! ?

4 Есть ли физический смысл у обменной энергии? Можно ли пользоваться методом возмущений для системы, состоящей более чем 30 электронов?

5 С помощью какого приёма сводится уравнение Лапласа к задаче о минимуме функционала?

6 В чем отличие метода Ритца от метода Релея в поиске решений вариационных задач?

7 Как выразить потенциал Хартри?

8 Какую идею внес Фок в этот метод?

9 Какой метод использовал Селянин?

10 Какие существуют формы для записи первого уравнения Максвелла?

11 Где встречается уравнение Пуассона?

12 Для чего нужны частичные функции распределения?

13 Какие предположения используются при выводе основного уравнения Томаса –Ферми?

14 Какова схема расчета свободной энергии при использовании модели Томаса – Ферми?

15 Какие проблемы возникают при описании систем, у которых число степеней свободы порядка 1000?

16 В чём состоит основная идея теории Кона–Шема?

17 Объясните почему теория Кона-Шэма (метод функционала плотности) лежит в основе современных расчетов электронных свойств конденсированных систем?

18 Запишите согласованные уравнения Кона – Шэма.

19 Перечислите приближения, используемые для записи обменнокорелляционного функционала энергии.

20 Перечислите основные этапы решения уравнений Кона–Шэма. Какие вычислительные алгоритмы используются на каждом этапе?

21 Как установить программное обеспечение на компьютер, включая операционную систему (Linux) и Quantum ESPRESSO в Linux?

22 Как запустить Quantum ESPRESSO для расчета свойств каждого из материалов?

23 Как определить параметры во входном файле для каждого шага расчета?

24 Какие действия надо предпринять для расчета полной энергии с помощью самосогласованного поля?

25 Какие пакеты надо использовать для расчета электронные свойств, колебаний кристаллической решетки, оптических свойств, для двумерных материалов?

26 В чем заключается модифицирование локального потенциала Слэтера (МЛПС) для обменно корреляционной энергии?

27 Как вывести уравнение Кона – Шена с помощью МПЛС?

28 Какие основные шаги алгоритма работы комплекса программ "Атом"?

29 Какие опорные функции используются в программном комплексе "Молекула"?

30 В чем отличие методов молекулярных орбиталей (МО) от метода опорной функции (МОФ)?

2 Тестирование по результатам освоения лекционного материала и самостоятельной работы

Тестирование проводится для определения степени усвоения материалов лекций, а также выполнения самостоятельной работы в рамках часов, отведенных на самостоятельную работу обучающихся, в СУО «Moodle».

Перечень вопросов для тестирования:

1. Чему равно число членов в нерелятивистском гамильтониане для атома гелия при неподвижном ядре?

а) 1;

б) 2;

в) 3;

г) 4.

2. Значением какого квантового числа (значениями квантовых чисел) определяется энергия электрона в атоме гелия?

а) n, l;

б) m, s;

в) l, m;

г) n, s.

3. Что минимизируется при решении квантово-механической задачи вариационным методом?

а) электронная энергия;

б) множители Лагранжа;

в) межэлектронное отталкивание;

г) коэффициенты разложения молекулярных орбиталей по атомным орбиталям.

4. Какое из утверждений верно для метода Хартри-Фока?

а) гамильтониан можно представить как сумму одно- и двухэлектронных операторов;

б) гамильтониан можно представить как сумму операторов, каждый из которых зависит только от координат одного электрона;

в) полная энергия атома $E=Ne_i$, где $e_i=e_j$ при любых i и j – энергии занятых орбиталей;

г) полная энергия многоэлектронной системы равна сумме полных энергий всех электронов за вычетом энергии межэлектронного отталкивания.

5. Почему методом Хартри-Фока нельзя получить точные волновые функции и энергии атомов или молекул?

а) не учитывается электронная корреляция;

б) электронная корреляция учитывается, но не полностью;

в) учитывается принцип Паули;

г) не учитывается принцип Паули.

6. Простое произведение орбиталей не является подходящим описанием состояния многоэлектронной системы, а требуется детерминант Слейтера, потому что …

а) при этом выполняется принцип Паули;

б) только в этом случае в полной мере учитывается электронная корреляция;

в) только применение детерминанта Слейтера позволяет использовать вариационный принцип;

г) при этом не выполняется принцип Паули.

7. Какова размерность детерминанта Слейтера для атома углерода?

а) 3;

б) 5;

в) 6;

г) 8.

8. Какова размерность детерминанта Слейтера для молекулы воды?

а) 3;

б) 6;

в) 10;

г) 12.

9. Чему равна первая поправка к энергии по теории возмущений к методу Хартри-Фока?

а) равна нулю;

б) описывает более половины корреляционной энергии;

в) всегда отрицательна;

г) всегда положительна.

10. Почему в методе Хартри-Фока электронная корреляция в основном не учитывается?

а) использования приближения независимых частиц;

б численных ошибок метода;

в) использования вариационного принципа;

г) ограниченного числа функций в базисном наборе.

3 Выполнение практических работ

Задания для практических работ, теоретический и методический материал для самостоятельного изучения и вопросы для собеседования представлены в методических указаниях к практическим занятиям.

Примеры заданий для выполнения практических работ:

Практическая работа «Спин-орбитальное взаимодействие в атоме гелия»

Описать движение электрона со спином в постоянном магнитном поле используя уравнение Шредингера, учитывающий явный вид операторов Паули. Найти средние значения проекций операторов спина на оси координат.

Практическая работа «Вариационная производная. Метод фазового поля»

Найти экстремаль функционала $V(y) = \int_{x_1}^{x_2} y'(1 + x^2 y')dx$, проходящие через заданные точки A(1,3) и B(2,5).

Практическая работа «Численные методы решения краевой задачи нелинейного уравнения Пуассона»

Решить числено краевую задачу для уравнения Томаса – Ферми.

$$\varphi'' - \varphi'/x = ax\varphi^{3/2};\ \phi(0) = c,\ \varphi'(0) = 2\varphi(1).$$

Практическая работа «Численное решение уравнения Кона-Шема»

Решить численно уравнение Кона-Шена

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} + \left(\frac{1}{4r^2} - 2(V_m(r,z) - E_1\right)Y + G_1(r,z) = 0,$$

$$G_1 = 2\sqrt{\frac{r\xi^3}{2\pi(1+S)}}\left(\left(E_1 - \varepsilon_1 - Q_1(r,z)\right)\exp(-\xi r_{a1}) + \left(E_1 - \varepsilon_1 - Q_2(r,z)\right)\exp(-\xi r_{a2})\right),$$

$$V_m = -\frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{a2}}, Q_k(r,z) = V_m(r,z) + \frac{\xi}{r_{ak}};$$

$$r_{a1} = \sqrt{(r - R/2)^2 + z^2},\ r_{a2} = \sqrt{(r + R/2)^2 + z^2},$$

$$\rho = \xi R, S = \left(1 + \rho + \rho^2/3\right)\exp(-\rho),$$

$$\varepsilon_1 = -\xi^2/2 + \left(\xi(\xi - 1) - \xi\zeta + \xi(\xi - 2)\tau\right)/(1 + S).$$

Практическая работа «Основы работы в пакете Quantum ESPRESSO»

Разработать проекты в открытом пакете Quantum ESPRESSO

Практическая работа «Алгоритм работы программ "Атом" и "Молекула"»

Разработать коды в пакетах «Атом» и «Молекула» Белгородского университета.

3 Вопросы к экзамену для промежуточной аттестации (5 семестр)

1 Общие понятия о методах математического описания систем взаимодействующих частиц.
2 Неэмпирические (квантово-механические) методы.
3 Полуэмпирические методы.
4 Эмпирические методы.
5 Методы Монте-Карло.
6 Основы метода молекулярной динамики.
7 История развития метода молекулярной динамики.
8 Реализация метода молекулярной динамики.

9 Граничные (краевые) условия.
10 Оптимизация вычислений.
11 Определение длины временного шага.
12 Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле.
13 Численное интегрирование уравнений движения. Скоростной алгоритм Верле.
14 Численное интегрирование уравнений движения. Метод с перешагиванием.
15 Численное интегрирование уравнений движения. Метод «предиктор-корректор» Гира.
16 Расчет макроскопических величин.
17 Моделирование различных термодинамических ансамблей.
18 Энергия межатомного взаимодействия в кристалле.
19 Статическая и тепловая энергия в кристалле.
20 Эмпирические критерии энергии межатомного взаимодействия.
21 Метод минимизации энергии.
22 Виды потенциалов.
23 Парные потенциалы.
24 Многочастичные потенциалы.
25 Кулоновское взаимодействие.

4 Вопросы к экзамену для промежуточной аттестации (6 семестр)

1 Возникновение квантовой теории (от Планка до Шредингера).
2 Функция и оператор Гамильтона.
3 Собственные функции и собственные значения операторов.
4 Простые задачи квантовой механики.
5 Задачи квантовой механики, допускающие аналитическое решение.
6 Атом водорода.
7 Радиальная и шаровая функции.
8 Задачи Штурма – Лиувиля.
9 Главные квантовые числа.
10 Многоэлектронные задачи.
11 Атом гелия.
12 Детерминант Слэтера.
13 Обменная энергия.
14 Вариационные методы.
15 Метод Хартри – Фока.
16 Метод Селянина.
17 Электронная структура системы многих тел.
18 Теория Томаса – Ферми.
19 Локальный эффективный внешний потенциал.
20 Численное решение уравнения Кона–Шема.

21 Пакет «Quantum ESPRESSO».
22 Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности.
23 Программные пакеты теории функционала плотности.
24 Пакет «Атом».
25 Пакет «Молекула».