

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
_____ Л.Д. Павлова
подпись
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы многомасштабного моделирования

01.03.02 «Прикладная математика и информатика»
(направленность (профиль): «Прикладная математика и информатика»)

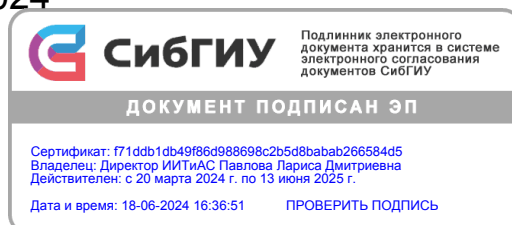
Квалификация выпускника
Бакалавр

Форма обучения
Очная форма

Срок обучения: 4 года

Год начала подготовки 2024

Новокузнецк
2024



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			<i>экзамен</i>	<i>экзамен</i>
Трудоёмкость	<i>академ. час.</i>	288	108	180
	<i>зачетных единиц</i>	8	3	5
Лекции, <i>академ. час.</i>		48	16	32
в форме практической подготовки		0	0	0
Лабораторные работы, <i>академ. час.</i>		0	0	0
в форме практической подготовки		0	0	0

Практические занятия, <i>академ. час.</i>	64	16	48
в форме практической подготовки	0	0	0
Курсовая работа / проект, <i>академ. час.</i>	0	0	0
в форме практической подготовки	0	0	0
Консультации, <i>академ. час.</i>	0	0	0
в форме практической подготовки	0	0	0
Самостоятельная работа, <i>академ. час.</i>	131	49	82
в форме практической подготовки	0	0	0
Контроль, <i>академ. час.</i>	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 Многоэлектронные модели;

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 – Лиувилля. Главные квантовые числа.);

Тема 3.3 Многоэлектронные задачи (Атом гелия. Детерминант Слэтера. Обменная энергия);

Тема 3.4 Вариационные методы (Метод Хартри – Фока. Метод Селянина);

Тема 3.5 Электронная структура системы многих тел (Теория Томаса – Ферми);

Тема 3.6 Локальный эффективный внешний потенциал (Численное решение уравнения Кона–Шема);

Тема 3.7 Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности (Пакет «Quantum ESPRESSO»);

Тема 3.8 Программные пакеты теории функционала плотности (Пакеты «Атом» и «Молекула»).

5 Перечень тем лекций

№ раздела / темы дисциплины	Темы лекций	Трудоемкость, <i>академ. час</i>	
		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 описания систем взаимодействующих частиц	2	
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.	Многоэлектронные модели		
Тема 3.1.	Математический аппарат квантовой механики	4	
Тема 3.2.	Задачи квантовой механики, допускающие аналитическое решение	4	
Тема 3.3.	Многоэлектронные задачи	4	
Тема 3.4.	Вариационные методы	4	
Тема 3.5.	Электронная структура системы многих тел	4	
Тема 3.6.	Локальный эффективный внешний потенциал	4	
Тема 3.7.	Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности	4	
Тема 3.8.	Программные пакеты теории функционала плотности	4	
Итого:		48	0

6 Перечень тем практических занятий (семинаров)

№ раздела / темы дисциплины	Темы практических занятий (семинаров)	Трудоемкость, <i>академ. час</i>	
		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 взаимодействующих	2	

	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.	Многоэлектронные модели		
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	
Тема 3.3.	Спин-орбитальное взаимодействие в атоме гелия.	4	
Тема 3.4.	Вариационная производная. Метод фазового поля.	6	
Тема 3.5.	Численные методы решения краевой задачи нелинейного уравнения Пуассона.	6	
Тема 3.6.	Численное решение уравнения Кона-Шема.	8	
Тема 3.7.	Основы работы в пакете Quantum ESPRESSO	8	
Тема 3.8.	Алгоритм работы программ "Атом" и "Молекула"	8	
Итого:		64	0

7 Перечень тем лабораторных работ

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

8 Перечень тем курсовых работ (проектов)

№ раздела / темы дисциплины	Темы курсовых работ (проектов)	Трудоемкость, <i>академ. час</i>	
		всего	в форме практической

			подготовки
	<i>Отсутствуют</i>		
Итого:		0	0

9 Виды самостоятельной работы

№ раздела / темы дисциплины	Виды самостоятельной работы	Трудоемкость, <i>академ. час</i>	
		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.	82	
<i>Контроль</i>	<i>Подготовка к экзамену (5 семестр)</i>	27	
<i>Контроль</i>	<i>Подготовка к экзамену (6 семестр)</i>	18	
Итого:		176	0

10 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: 29.02.2024);

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: 29.02.2024);

3 Клунникова, Ю. В. Моделирование физических процессов методом молекулярной динамики : учебное пособие / Ю. В. Клунникова,

М. В. Анিকেев. — Ростов-на-Дону : ЮФУ, 2021. — 91 с. — ISBN 978-5-9275-3919-2. — URL: <https://e.lanbook.com/book/247049> (дата обращения: 29.02.2024);

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: 29.02.2024);

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: 29.02.2024);

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: 29.02.2024).

б) ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

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

2 ЛАНЬ : электронно-библиотечная система : [коллекция «Инженерно-технические науки»] / ООО «Издательство ЛАНЬ». — Санкт-Петербург, [200 –]. — URL: <http://e.lanbook.com>. — Режим доступа: для авторизир. пользователей;

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

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

5 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>;

6 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>;

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

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

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;
- P7-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.

11 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.

Приложение

Аннотация рабочей программы дисциплины «Методы многомасштабного моделирования»

по направлению подготовки (специальности)
01.03.02 «Прикладная математика и информатика»
(направленность (профиль): «Прикладная математика и
информатика»)
форма обучения – Очная форма

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 учебной дисциплины

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

в форме практической подготовки	0	0	0
Самостоятельная работа, <i>академ. час.</i>	131	49	82
в форме практической подготовки	0	0	0
Контроль, <i>академ. час.</i>	45	27	18
в форме практической подготовки	0	0	0

5 Краткое содержание учебной дисциплины

В структуре учебной дисциплины выделяются следующие основные разделы (темы):

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 Многоэлектронные модели;

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 – Лиувилля. Главные квантовые числа.);

Тема 3.3 Многоэлектронные задачи (Атом гелия. Детерминант Слэтера. Обменная энергия);

Тема 3.4 Вариационные методы (Метод Хартри – Фока. Метод Селянина);

Тема 3.5 Электронная структура системы многих тел (Теория Томаса – Ферми);

Тема 3.6 Локальный эффективный внешний потенциал (Численное решение уравнения Кона–Шема);

Тема 3.7 Основные этапы построение проектов в пакетах теории функционала плотности (Пакет «Quantum ESPRESSO»);

Тема 3.8 Программные пакеты теории функционала плотности (Пакеты «Атом» и «Молекула»).

6 Составитель(и):

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

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