

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
математического и прикладного анализа
(Шашкин А.И.)
21.05.2023г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.О.13 Компьютерное моделирование в математической физике

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

01.04.02 Прикладная математика и информатика

2. Профиль подготовки/специализация: Информационные технологии в экономической деятельности

3. Квалификация (степень) выпускника: магистр

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:

математического и прикладного анализа

6. Составители программы:

Тимошенко Ю.К., доктор физ.- мат. наук, доцент

7.Рекомендована: *НМС факультета ПММ* 21.05.2023 №9

8. Учебный год: 2024/2025

Семестр(ы): 3

9.Цели и задачи учебной дисциплины:

целью курса “Компьютерное моделирование в математической физике” является изучение типичных математических моделей многоатомных квантовых систем, а также выполнение компьютерного моделирования с использованием этих моделей.

В задачи курса входят: уверенное овладение студентами формализмом изучаемых моделей и приемами их программной реализации; приобретение обучаемыми навыков численного решения некоторых стандартных задач математической квантовой физики многоатомных систем с использованием написанных ими оригинальных кодов и современных научных программных комплексов.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина относится к Блоку 1, обязательной части учебного плана. Для освоения дисциплины студент должен владеть входными знаниями в объеме курсов: «Алгебра», «Математический анализ», «Дифференциальные уравнения», «Комплексный анализ», «Уравнения математической физики», «Физика», «Информатика и программирование», «Программирование и научные вычисления на языке Python», «Параллельное программирование».

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Код и наименование индикаторов достижения компетенции		Планируемые результаты обучения
Код	Название	Код	Название	
ОПК-1	Способен решать актуальные задачи фундаментальной и прикладной математики	ОПК-1.1	Решает типовые задачи с учетом основных понятий и общих закономерностей, сформулированные в рамках базовых дисциплин математики, информатики и естественных наук	Знать: основы базовых физико-математических дисциплин и курсов по программированию. Уметь: применять полученные знания для создания физико-математических моделей и компьютерного моделирования. Владеть: способностью численно решать задачи математической физики и выполнять элементарный анализ результатов численного эксперимента.
ОПК-3	Способен разрабатывать математические модели и проводить их анализ при решении задач в области профессиональной деятельности	ОПК-3.2	Применяет технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента для проведения комплексного исследования научной или технической проблемы	Знать: состояние научных исследований, их актуальную проблематику по направлению профессиональной деятельности. Уметь: понимать суть проблем, использовать научные положения и факты для их математической формализации. Владеть: знаниями и навыками численного решения задач математической физики.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4/144.

Форма промежуточной аттестации: зачет.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			3 семестр
Аудиторные занятия		48	48
в том числе:	лекции	32	32
	практические	0	0
	лабораторные	16	16
Самостоятельная работа		96	96
в том числе: курсовая работа (проект)		0	0
контроль			36
Форма промежуточной аттестации		Зачет – 0 час.,	Зачет – 0 час.,
Итого:		144	144

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Введение.	Обзор основных уравнений нерелятивистской квантовой механики. Обзор математических моделей многоэлектронных квантовых систем. Квантовые модели Хартри-Фока, Хартри-Фока-Рутана, Хартри-Фока-Слейтера.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631
1.2	Стационарное уравнение Шрёдингера. Одночастичные задачи.	Алгоритмы решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера и их программная реализация. Компьютерное моделирование квантовых состояний частицы в одномерном потенциале произвольной формы, сферически симметричном потенциале.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631
1.3	Многоэлектронный атом в приближении самосогласованного поля. Модель Хартри-Фока.	Формализм Хартри-Фока в приближении самосогласованного поля. Компьютерное моделирование основного квантового состояния атома гелия.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631
1.4	Модель Хартри-Фока-Рутана для многоатомных систем	Неэмпирические и полумэмпирические модели Хартри-Фока-Рутана. Алгоритмы и программная реализация. Обзор современных научных программных комплексов для моделирования многоатомных систем. Компьютерное моделирование квантовых состояний наноструктур на основе углерода и кремния. Визуализация результатов компьютерного моделирования.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631
2. Практические занятия			
3. Лабораторные работы			
3.1	Численное решение уравнения Шрёдингера: метод пристрелки	Компьютерное моделирование стационарных квантовых состояний частицы в одномерной потенциальной яме произвольного профиля с бесконечными стенками путем численного решения стационарного уравнения Шрёдингера методом пристрелки. Язык программирования — Python 3, но возможно использование и других языков программирования.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631

3.2	Численное решение уравнения Шрёдингера: теория возмущений	Компьютерное моделирование стационарных квантовых состояний частицы в одномерной потенциальной яме произвольного профиля с бесконечными стенками путем численного решения стационарного уравнения Шрёдингера в рамках теории возмущений Рэлея-Шрёдингера. Выполнение сравнения полученных результатов с данными компьютерного моделирования методом пристрелки. Язык программирования — Python 3, но возможно использование и других языков программирования.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631
3.3	Численное решение уравнения Шрёдингера: вариационный подход	Компьютерное моделирование стационарных квантовых состояний частицы в одномерной потенциальной яме произвольного профиля с бесконечными стенками путем численного решения стационарного уравнения Шрёдингера с использованием вариационного подхода. Выполнение сравнения полученных результатов с данными компьютерного моделирования методом пристрелки. Язык программирования — Python 3, но возможно использование и других языков программирования.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение.	4	0	0	12	16
2	Стационарное уравнение Шрёдингера. Одночастичные задачи.	8	0	8	37	53
3	Многэлектронный атом в приближении самосогласованного поля. Модель Хартри-Фока.	8	0	4	18	30
4	Модель Хартри-Фока-Рутана для многоатомных систем. Программный комплекс GAMESS: назначение и возможности, подготовка исходных файлов, структура данных в выходных файлах. Визуализация расчетных данных с помощью приложения Avogadro.	12	0	4	29	45
	Итого:	32	0	16	96	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Подготовка к лекционному занятию включает выполнение всех видов заданий, рекомендованных к каждой лекции, то есть задания выполняются еще до лекционного занятия по соответствующей теме.

В ходе лекционных занятий необходимо вести конспектирование учебного материала, обращать внимание на 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.

Необходимо задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций. Целесообразно дорабатывать свой конспект лекции, делая в нем соответствующие записи из литературы, рекомендованной преподавателем и предусмотренной учебной программой.

Выполнение лабораторных работ по этому курсу проводится в тесном контакте с преподавателем. Поэтому не допускается пропуск занятий без уважительных причин, так как значительно усложнятся и работа над лабораторными работами, и их защита.

При использовании дистанционных образовательных технологий и электронного обучения выполнять все указания преподавателей по работе на LMS-платформе, своевременно подключаться к online-занятиям, соблюдать рекомендации по организации самостоятельной работы.

К промежуточной аттестации (зачету) стоит готовиться по выданным преподавателями, реализующими дисциплину, теоретическим вопросам с учетом конспектов лекционных занятий, а также предлагаемой в рабочей программе дисциплины литературы.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Тимошенко, Ю.К. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера: метод пристрелки : учебное пособие для ВУЗов : [для магистрантов фак. прикладной математики, информатики и механики 2-го года обучения по специальности "Прикладная математика и информатика", для направления: 01.04.02 - Прикладная математика и информатика] / Ю.К. Тимошенко ; Воронеж. гос. ун-т, Фак. приклад. математики, информатики и механики .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр "Научная книга", 2019 .— 35 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 35.
2	Тимошенко, Ю.К. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера: теория возмущений : учебное пособие для ВУЗов : [для магистрантов фак. прикладной математики, информатики и механики 2-го года обучения по направлению "Прикладная математика и информатика", для направления: 01.04.02 - Прикладная математика и информатика] / Ю.К. Тимошенко ; Воронеж. гос. ун-т, Фак. приклад. математики, информатики и механики .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр "Научная книга", 2019 .— 14 с. : цв.ил. — Библиогр.: с. 14.
3	Сабитов К. Б. Уравнения математической физики : [учебник для студ. вузов, обуч. по направлению ВПО 010400 "Прикладная математика и информатика"] / К.Б. Сабитов .— Москва : Физматлит, 2013 .— 352 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4	Новосадов Б.К. Методы математической физики молекулярных систем / Б.К. Новосадов - М. : ЛИБРОКОМ, 2010 .— 383 с.
5	Молекулярное моделирование. Теория и практика / Х.-Д. Хельтье [и др.] — М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010 .— 318 с.
6	Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. - Спб.: БХВ-Петербург, 2011. - 704 с.
7	Тахтаджян Л.А. Квантовая механика для математиков / Л.А. Тахтаджян.- Москва ; Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика: Институт компьютерных исследований, 2011.- 495 с.
8	Кунин С. Вычислительная физика / Кунин С. - М.: Мир, 1992 .— 518 с.
9	Фаддеев Л. Д. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков / Л.Д.Фаддеев, О.А.Якубовский .— 2-е изд. — М.; Ижевск: Регуляр. и хаот. динамика, 2001 .- 255 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник (ресурс)
1	Зональная научная библиотека ВГУ (https://biblioclub.ru/)
2	Быкова М.И. Уравнения математической физики в системе MAPLE : учебно-методическое пособие : [для студ. 3 к. фак. приклад. математики, информатики и механики направления 010400 - Прикладная математика и информатика; 010500 - Математическое обеспечение и администрирование информ. сетей; 010800 - Механика и мат. моделирование 010300 - Фундамент. информатика и информ. технологии] / М.И. Быкова, С.А. Шашкина ; Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2012 .— 23 с. URL:
3	Классические и современные методы уравнений математической физики в примерах и задачах : учебно-методическое пособие для вузов : [для специальностей: 010501 - Прикладная математика и информатика, 010901 - Механика, 010503 - Математическое обеспечение и администрирование информационных систем] / Воронеж. гос. ун-т ; сост. : М.И. Быкова, Ю.В. Засорин .— Воронеж : ИПЦ ВГУ, 2010 .— 28 с. URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m10-210.pdf
4	ЭБС «Консультант студента» (https://www.studmedlib.ru)
5	ЭБС «Лань» (https://e.lanbook.com)

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Тимошенко, Ю.К. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера: метод пристрелки : учебное пособие для ВУЗов : [для магистрантов фак. прикладной математики, информатики и механики 2-го года обучения по специальности "Прикладная математика и информатика", для направления: 01.04.02 - Прикладная математика и информатика] / Ю.К. Тимошенко ; Воронеж. гос. ун-т, Фак. приклад. математики, информатики и механики .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр "Научная книга", 2019 .— 35 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 35.
2	Тимошенко, Ю.К. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера: теория возмущений : учебное пособие для ВУЗов : [для магистрантов фак. прикладной математики, информатики и механики 2-го года обучения по направлению "Прикладная математика и информатика", для направления: 01.04.02 - Прикладная математика и информатика] / Ю.К. Тимошенко ; Воронеж. гос. ун-т, Фак. приклад. математики, информатики и механики .— Воронеж : Издательско-полиграфический центр "Научная книга", 2019 .— 14 с. : цв.ил. — Библиогр.: с. 14.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы

ПО: Ananconda Python 3; Pycharm; GAMESS; Avogadro.

Имеется курс в Moodle на портале «Электронный университет ВГУ»: <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=10631>

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

1) Учебная аудитория для проведения лекций: специализированная мебель, компьютер (ноутбук), мультимедийное оборудование (проектор, экран). 39

2) Учебная аудитория для проведения лабораторных работ: специализированная мебель, персональные компьютеры персональные компьютеры в количестве, обеспечивающем возможность индивидуальной работы, компьютер преподавателя, мультимедийное оборудование (проектор, экран). ОС Windows 8 (10), ПО Adobe Reader, ПО Anaconda Python 3; Pycharm, ПО GAMESS (аналоги), Avogadro (аналоги).

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ОПК-1	Знать: основы базовых физико-математических дисциплин и курсов по программированию.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита
	Уметь: применять полученные знания для создания физико-математических моделей и компьютерного моделирования.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита
	Владеть: способностью численно решать задачи математической физики и выполнять элементарный анализ результатов численного эксперимента.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита

ОПК-3	Знать: состояние научных исследований, их актуальную проблематику по направлению профессиональной деятельности.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита
	Уметь: понимать суть проблем, использовать научные положения и факты для их математической формализации.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита
	Владеть: знаниями и навыками численного решения задач математической физики.	Разделы 1.2, 1.3, 1.4, 3.1, 3.2, 3.3	Устный опрос, процесс выполнения лабораторных работ и их защита
Промежуточная аттестация			КИМ

* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – зачтено, не зачтено. Принимается во внимание выполнение всех 3-х лабораторных работ и их успешная защита. Если обучаемый не выполнил все три лабораторные работы, или не смог их все защитить, то зачет не ставится.

Для оценивания результатов обучения на зачете принимается во внимание:

- 1) знание учебного материала и владение понятийным аппаратом курса;
- 2) обладание алгоритмическим мышлением, способностью реализовывать алгоритмы в виде программных кодов;
- 3) умение выполнять численный эксперимент и анализировать его результаты.

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач в области компьютерного моделирования в математической физике.	Повышенный уровень	зачтено
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), но допускает ошибки не принципиального характера.	Базовый уровень	зачтено
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум(трем) из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы. Демонстрирует частичные знания допускает существенные ошибки.	Пороговый уровень	зачтено
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трем(четырем) из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	незачтено

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Тестовые задания для лабораторных работ

Лабораторная работа №1. Вариант №1.

Электрон находится в потенциальном поле $U(x) = V_0 \cdot v(x)$,

/ $M_{2,1.5}(x)$, $x \in [-L, L]$;

$v(x) =$ (

$\backslash \infty, \quad -L \geq x \geq L,$

где $V_0 = 20$ eV, $L = 4$ Å, $M_{k,m}(x)$ – функция Уиттекера. Найти энергии, нормированные волновые функции и плотности вероятности для основного и 2-го возбужденного состояний. Вычислить для этих состояний квантовомеханические средние $\langle x \rangle$ и $\langle x^2 \rangle$.

Лабораторная работа №3. Вариант №2.

Электрон находится в потенциальном поле $U(x) = V_0 \cdot v(x)$,

/ $\sin(x) \cdot \cos(x/4)$, $x \in [-L, L]$;

$v(x) =$ (

$\backslash \infty, \quad -L \geq x \geq L,$

где $V_0 = 25$ eV, $L = 4$ Å. Найти энергии, нормированные волновые функции и плотности вероятности для основного квантового состояния. Вычислить квантовомеханические средние $\langle p_x \rangle$ и $\langle p_x^2 \rangle$. Сравнить полученные численные данные с результатами расчетов методом пристрелки.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме(ах): *устного опроса и письменных работ (лабораторные работы)*. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практическое(ие) задание(я), позволяющее(ие) оценить степень сформированности умений и(или) навыков.