

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

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

Физико-технический факультет
Кафедра теоретической физики и нанотехнологий

УТВЕРЖДАЮ
проректор

_____ П. А. Машаров
«17» апреля 2025 г.
МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Укрупненная группа направлений подготовки	28.00.00 Нанотехнологии и наноматериалы
Программа высшего образования	Программа бакалавриата
Направление подготовки	28.03.03 Наноматериалы
Направленность (профиль) образовательной программы	Наноматериалы
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная

Рабочая программа может быть адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2025

Рабочая программа дисциплины «**Методы математического моделирования**» для обучающихся по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы), составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 28.03.03 Наноматериалы, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22 сентября 2017 г. № 968 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2025 года.

Разработчик:

доцент кафедры теоретической физики и
нанотехнологий,
канд. физ.-мат. наук

В. И. Фиохин

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий.

Протокол от 10.04.2025 г. № 18.

Заведующий кафедрой

А. Г. Петренко

СОГЛАСОВАНО:

И.о. декана физико-технического факультета
16.04.2025 г.

С. А. Фоменко

Учебно-методическая комиссия физико-технического факультета.

Протокол от 16.04.2025 г. № 4

Председатель

В. Н. Котенко

Руководитель основной образовательной
программы, д-р физ.-мат. наук, проф.
10.04.2025 г.

А. Г. Петренко

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

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

базовая подготовка по математике в объеме программы средней школы;

дисциплины программы бакалавриата: Математический анализ, Аналитическая геометрия и линейная алгебра, Дифференциальные уравнения

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

Статистическая физика и термодинамика, Производственная практика: научно-исследовательская работа, Производственная практика: практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы (далее – ОП)	28.03.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.Б.33 Методы математического моделирования
Часть образовательной программы	Базовая часть
Количество зачетных единиц / всего часов	3 / 108

В случае предъявления от обучающегося или его родителя (законного представителя) заявления на обучение по адаптированной образовательной программе высшего образования, подкрепленного заключением психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК) или медико-социальной экспертизы (МСЭ) с рекомендациями создания индивидуальной программы реабилитации и абилитации (ИПРА), данная рабочая программа может быть адаптирована с учетом индивидуальных особенностей здоровья обучающегося.

2.2. Распределение часов по формам и периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы + контроль	всего	
Очная	3	6	32	-	32	44	108	экзамен

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Формирование умений и компетенций для обеспечения эффективного применения математических моделей и методов проведения практических исследований.

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

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ОПК-1. Способен решать задачи профессиональной деятельности на основе применения естественнонаучных и общетехнических знаний, методов математического анализа и моделирования	ОПК-1.37. Разрабатывает компьютерные модели исследуемых процессов и систем	ОПК-1.37.1. Знает основные понятия теории математического моделирования, классификацию моделей и области их использования, задачи моделирования ОПК-1.37.2. Умеет выполнять анализ исследуемой системы или процесса, обоснованно выбирать метод моделирования ОПК-1.37.3. Владеет методами и приемами работы в системах моделирования, основными критериями оценки полученных результатов моделирования
	ОПК-1.38. Использует математические модели физических систем для изучения и прогнозирования их свойств.	ОПК-1.38.1. Знает основные средства моделирования, применяемые в процессе проектирования систем на разных стадиях детализации проекта, методы моделирования и анализа систем, принципы построения моделей ОПК-1.38.2. Умеет строить адекватную модель системы или процесса с использованием современных компьютерных средств, интерпретировать и анализировать результаты моделирования ОПК-1.38.3. Владеет опытом использования в ходе моделирования научно-технической информации, Internet-ресурсов, баз данных и каталогов, электронных журналов и патентов, поисковых ресурсов и др.

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Решение уравнения Шредингера	
Современные методы молекулярной динамики.	Современные методы молекулярной динамики.
Метод Монте-Карло для спиновых систем.	Метод Монте-Карло для спиновых систем.
Квантовый метод Монте-Карло.	Квантовый метод Монте-Карло.
Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.	Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.
Раздел 2. Метод псевдопотенциала	
Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали	Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.

как базисные функции приближенных решений.	
Теория функционала электронной плотности.	Теория функционала электронной плотности.
Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.	Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.
Метод псевдопотенциала.	Метод псевдопотенциала.
Первопринципиальная молекулярная динамика.	Первопринципиальная молекулярная динамика.
Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 3, семестр – 6

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Решение уравнения Шредингера	16		16	22	54
Современные методы молекулярной динамики.	2		2	4	8
Метод Монте-Карло для спиновых систем.	2		2	4	8
Квантовый метод Монте-Карло.	4		4	4	12
Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	4		4	5	13
Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.	4		4	5	13
Раздел 2. Метод псевдопотенциала	16		16	22	54
Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.	2		2	3	7
Теория функционала электронной плотности.	2		2	3	7
Метод присоединенных плоских волн. Метод линеаризованных присоединенных плоских волн.	2		2	4	8
Метод псевдопотенциала.	2		2	4	8
Первопринципиальная молекулярная динамика.	4		4	4	12
Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.	4		4	4	12
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	32	–	32	44	108

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

7.1. Контрольные вопросы

Раздел 1

1. Современные методы молекулярной динамики.
2. Монте-Карло для спиновых систем.
3. Квантовый метод Монте-Карло.
4. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
5. Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.

Раздел 2

6. Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
7. Теория функционала электронной плотности.
8. Метод присоединенных плоских волн. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн.
9. Метод псевдопотенциала.
10. Первопринципиальная молекулярная динамика.
11. Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

7.2. Темы письменных работ (типы задач)

- Современные методы молекулярной динамики.
- Метод Монте-Карло для спиновых систем.
- Квантовый метод Монте-Карло.
- Решение уравнения Шредингера для атома водорода.
- Многоэлектронные атомы. Метод Хартри-Фока.
- Электронная структура твердых тел: плоские волны и атомные орбитали как базисные функции приближенных решений.
- Теория функционала электронной плотности.
- Метод присоединенных плоских волн. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн.
- Метод псевдопотенциала.
- Первопринципиальная молекулярная динамика.
- Методы расчета электронной структуры и свойств низко измеримых систем.

Контрольная работа по проверке теоретических знаний – по всем темам, с использованием указанных выше контрольных вопросов.

7.3. Образец содержания экзаменационного билета

Донецкий государственный университет
Физико-технический факультет
Кафедра теоретической физики и нанотехнологий

Программа высшего образования	Программа бакалавриата
Направление подготовки	28.03.03 Наноматериалы
Профиль подготовки	Наноматериалы
Форма обучения	Очная, заочная
Семестр	Шестой
Дисциплина	Методы математического моделирования

Экзаменационный билет № 1

1. Квантовый метод Монте-Карло.
2. Теория функционала электронной плотности.
3. Метод псевдопотенциала

Утверждено на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий, протокол № _
от _____ 202_ г.

Заведующий кафедрой

Экзаменатор

В случае ведения учебного процесса с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, содержание билета может отличаться от приведенного.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже.

Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

Самостоятельная работа оценивается на основе предоставленных на проверку выполненных домашних, индивидуальных заданий с учетом своевременности их предоставления и соответствия требованиям к их выполнению.

Количество баллов за контрольную работу вычисляется как сумма баллов за все входящие в её состав задания. Каждое задание оценивается исходя из максимально возможного количества баллов с учетом правильности выполнения задания, полноты приводимых обоснований.

По результатам работы в семестре обучающийся, набравший не менее 60 баллов, имеет право получить оценку. Те, кто претендует на более высокий балл, проходят промежуточную аттестацию. Максимальное количество баллов на промежуточной аттестации – 100. Общее количество баллов за семестр вычисляется как максимальная из полученных за семестр и на промежуточной аттестации и выставляется согласно принятому порядку.

8.1. Семестр 6

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1-2	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	10
	Контрольные работы по практике	10
	Контрольная работа по теоретическому материалу	20
ИТОГО		60
Промежуточная аттестация (экзамен)		40
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

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

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

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

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете кафедры теоретической физики и нанотехнологий(ауд.256).

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

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

10. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

10.1. Основная литература

1. Методы математического моделирования и вычислительной диагностики : сб. тр. фак. вычисл. математики и кибернетики МГУ / Под ред. А. Н. Тихонова, А. А. Самарского. - М. : Изд-во МГУ, 1990. - 300 с.

2. Хеерман, Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман ; пер. с англ. В. Н. Задкова ; под ред. С. А. Ахманова. - М. : Наука, 1990. - 175 с.

3. Воеводин, В. В. Параллельные вычисления : Учеб. пособие для вузов по направлению "Прикладная математика и информатика" / В. В. Воеводин, Вл. В. Воеводин. - СПб. : БХВ-Петербург, 2002. - 608 с.

4. Павленко, Ю. Г. Лекции по теоретической механике : [Учеб. для физ. фак. ун-тов] / Ю. Г. Павленко. - М. : Изд-во МГУ, 1991. - 336 с.

10.2. Дополнительная литература

1. Бондаренко, Н. С. Методы математического моделирования в среде пакета Maple [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие по дисциплине "Методы математического моделирования" / Н. С. Бондаренко ; ГОУ ВПО Донецкий национальный университет, Факультет математики и информационных технологий, Кафедра прикладной механики и компьютерных технологий. - Донецк : ГОУ ВПО "ДонНУ", 2017. - Электронные данные (1 файл).

2. Лекции по теории функционала электронной плотности / [сост. А. В. Головчан] ; Донецкий нац. ун-т. - Донецк : ДонНУ, 2012. - 40 с

3. Вильф, Ф. Ж. Логическая структура частной теории относительности / Ф. Ж. Вильф. - М. : УРСС, 2001. - 158 с.

11. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ; Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.

2. **eLIBRARY.RU:** научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

3. Научная электронная библиотека **«КиберЛенинка»:** сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

4. Электронно-библиотечная система **«Лань»:** [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания Сетевой электронной библиотеки, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

5. **ЭБС Юрайт:** электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://urait.ru/library/svobodnyy-dostup/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания свободного доступа, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

6. **Электронно-библиотечная система ДонГУ:** сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

7. **Электронный каталог** Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.

8. **Электронный архив ДонГУ:** раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный.

12. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

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