

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанофізики конденсованих середовищ



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора  
з навчальної роботи

Галина ГРАБЧУК

«22» березня 2021 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

Комп'ютерне моделювання в природничих науках  
для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	другий (магістр)
освітньо-наукова програма	Високі технології (хімія та наноматеріали)
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>четвертий</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладач: Іванов І.І.

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)


Розробники:

Ільченко Володимир Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри нанофізики  
конденсованих середовищ

Русінчук Наталя Миколаївна, кандидат фізико-математичних наук, асистент кафедри нанофізики  
конденсованих середовищ

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанофізики конденсованих  
середовищ



Валерій СКРИШЕВСЬКИЙ

Протокол № 8 від «26» лютого 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «05» березня 2021 року №3  
Голова науково-методичної комісії



Наталя РУСІНЧУК

«05» березня 2021 року

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з відомими числовими алгоритмами для розв'язання фізичних, біологічних та хімічних задач та оволодіння підходами до моделювання процесів у природі, навичками використання сучасних типових числових методів та сучасних програмних середовищ.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

1. Знати основні поняття теорії моделювання, приклади динамічних та випадкових процесів у природничих науках.
2. Вміти записати диференціальне рівняння, що описує поведінку динамічної системи, розв'язати аналітично диференціальне рівняння.
3. Володіти елементарними навичками складання алгоритмів та написання програм для реалізації обчислень.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Предметом навчальної дисципліни є числові моделі фізичних процесів, алгоритми та методи моделювання фізичних явищ.

В курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до проведення моделювання: використання сіткових методів та кінцевих різницевоїх схем до розв'язання диференціальних рівнянь; числове моделювання фізичних процесів, що описуються рівняннями математичної фізики та застосування частинкових та імовірнісних методів до розв'язання рівнянь математичної фізики та їх використання для опису досить складних модельних об'єктів, що можуть бути описані лише за допомогою числових комп'ютерних моделей, зокрема таких об'єктів як перколяційні кластери, фрактали. Розглядаються принципи реалізації нейронних мереж та можливості їх застосування до моделювання природничих явищ.

**4. Завдання (навчальні цілі):**

Навчальні цілі дисципліни спрямовані на досягнення таких загальних та фахових компетентностей:

- ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності  
ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.  
ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.  
ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.  
ЗК5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.  
ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність), а також формулювати судження, маючи неповну або обмежену інформацію.  
ЗК7. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій в хімічних дослідженнях та професійній діяльності.  
ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.  
ФК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.  
ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.  
ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основні підходи до моделювання процесів у природничих науках, розуміти межі їх застосовності та точність, особливості побудови моделей в різних природничих науках.	Лекції	Письмова тестова робота  Опитування на лекціях	15%  5%

2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для створення комп'ютерних моделей реальних об'єктів та процесів з метою дослідження їх	Лабораторні роботи	Звіти по лабораторних роботах	45%
4.1	Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів чи систем.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота студента	Письмовий звіт з семестрової роботи та усний захист  Практичні домашні завдання до лекцій	30%  5%

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни		
	1.1	2.1	4.1
1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.	+	+	+
2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.			+
5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.	+	+	+
8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.			+

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання:

1. Письмова тестова робота: РН 1.1 - 15 балів/10 балів.

2. Лабораторні роботи: РН 2.1. - 45 балів/30 балів.

3. Самостійна семестрова робота: підготовка звіту та захист: РН 4.1 - 30 балів/20 балів.

4. Опитування під час лекцій: 5 балів/ 0 балів.

5. Виконання домашніх практичних завдань: 5 балів/0 балів.

Усього: 100 балів/60 балів.

#### - підсумкове оцінювання: відсутнє.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
<b>Всього</b>	60	100

### 7.2 Організація оцінювання:

Під час проведення інтерактивних лекцій студентам ставляться запитання, які оцінюються 1-2 бали. Протягом семестру кожен студент за правильні відповіді, дані під час лекцій, може отримати від 0 до 5 балів.

До кожної теми лекції студенти отримують домашні практичні завдання, які оцінюються в 1-3 бали, а під час наступної лекції студенти, що виконали ці завдання можуть представити свої розв'язки перед аудиторією. Протягом семестру за правильні розв'язки завдань кожен студент може отримати від 0 до 5 балів.

У кінці семестру після завершення вивчення тем на останній лекції (№10) проводиться письмова тестова робота. Контрольна робота спрямована на визначення рівня знань

*студентами матеріалів лекцій за весь семестр. Результати контрольної роботи студенти дізнаються у той самий день.*

*Протягом семестру студенти виконують лабораторні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.*

*Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та лабораторних занять. Результатом виконання семестрового завдання є письмовий звіт та усний захист.*

*Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (60 балів), для одержання заліку обов'язковим є виконання додаткових завдань.*

### **7.3 Шкала відповідності оцінок**

<b>Зараховано / Passed</b>	<b>60-100</b>
<b>Не зараховано / Fail</b>	<b>0-59</b>

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	самостійна робота
<b>Частина 1 Теоретичне навчання</b>				
1	<b>Вступ.</b> <b>Тема 1</b> Вступ. Загальні підходи до побудови комп'ютерних моделей та їх формалізації.	1		1
2	<b>Тема 2.</b> Різницеві похідні та точність комп'ютерного моделювання. Розв'язання диференційних рівнянь першого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	1		1
3	<b>Тема 3.</b> Розв'язання диференційних рівнянь другого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	2		2
4	<b>Тема 4.</b> Розв'язання крайових задач. Метод стрільби та метод скінченних різниць.	2		2
5	<b>Тема 5.</b> Розв'язання систем диференційних рівнянь. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність. Стаціонарні стани системи. Поняття тригера.	2		2
6	<b>Тема 6.</b> Загальні підходи до розв'язання диференційних рівнянь у частинних похідних. Зв'язані коливні системи. Перехід від системи рівнянь що описує зв'язані осцилятори до хвильового рівняння. Моделювання хвиль.	2		2
7	<b>Тема 7.</b> Фур'є аналіз. Швидке перетворення Фур'є. Вейвлет аналіз.	2		2
8	<b>Тема 8.</b> Поняття про метод Монте-Карло. Генератори випадкових чисел. Генерація числових послідовностей з заданим законом розподілу ймовірностей. Похибки при моделюванні методом Монте-Карло.	2		2
9	<b>Тема 9.</b> Системи «реакція-дифузія» в природничих науках та їх моделювання. Утворення порядку з хаосу.	2		2
10	<b>Тема 10.</b> Чисельне інтегрування. Розв'язання інтегральних рівнянь.	2		2
11	<b>Тема 11.</b> Перколяція. Фрактали. Клітинні автомати. Письмова тестова робота.	2		2
<b>Частина 2 Лабораторний практикум</b>				
11	<b>Тема 12.</b> Застосування різницевих схем до розв'язання диференційних рівнянь в природничих науках.		2	2
12	<b>Тема 13.</b> Моделювання випадкових процесів. Застосування методу Монте-Карло до розв'язання практичних завдань та моделювання процесів в природничих науках.		4	4
13	<b>Тема 14.</b> Моделювання систем «реакція-дифузія».		4	4
14	<b>Тема 15.</b> Застосування комп'ютерного моделювання до описання та дослідження систем в природничих науках.			30
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>20</b>	<b>10</b>	<b>60</b>

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – 20 год.

Лабораторні заняття - 10 год.

Самостійна робота - 60 год.

## 9. Рекомендовані джерела:

**Основна:**

1. Murray J.D. Mathematical Biology: I. An Introduction, Springer, 2002.
2. Murray J.D. Mathematical Biology: II. Spatial Models and Biomedical Applications, Springer, 2003.

***Додаткова:***

2. Х.Гулд, Я.Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. В 2-х томах. М., Мир, 1990, 750 с. Jost J. Mathematical Methods in Biology and Neurobiology, Max Planck Institute for Mathematics in the Sciences, 2007
3. Kisdi E. Mathematical Methods in Biology: lecture notes, University of Helsinki
4. Chasnov J.R. Mathematical Biology: Lecture notes, The Hong Kong University of Science and Technology, 2016
5. Р.П. Федоренко. Введение в вычислительную физику. М.: МФТИ, 1994, 330 с.
6. А.А. Самарский. Введение в численные методы. - М: Наука, 1987, 210 с.
7. Дж.Форсайт, В.Вазов. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М., Иностранная литература, 1963р, 487 с.

***Интернет - ресурсы:***

1. <https://diveintopython3.problemsolving.io/>
2. <https://www.scipy.org/>