

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанofізики конденсованих середовищ



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Комп'ютерне моделювання в природничих науках

(повна назва дисципліни)

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 102 Хімія
освітній рівень магістр
освітня програма Високі технології (Хемоінформатика)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>третій</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладач: Русінчук Наталя Миколаївна, асистент кафедри нанofізики конденсованих середовищ

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

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)


КИЇВ – 2021

Розробники:

Ільченко Володимир Васильович, професор, кафедра нанofізики конденсованих середовищ
Русінчук Наталя Миколаївна, асистент, кафедра нанofізики конденсованих середовищ

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанofізики конденсованих середовищ


_____ (Скришевський В.А.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

Протокол № 7 від «25» 02 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «05» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії 
_____ (Русінчук Н.М.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

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 диференційне рівняння, що описує поведінку динамічної системи, розв'язати аналітично диференційне 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 різницевих схем до розв'язання диференційних 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:

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК 12. Здатність працювати автономно.

ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК 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.

ФК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК 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.

ФК 9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

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, самостійна робота студента	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

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1	4.1
Програмні результати навчання			
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.	+	+	+
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.			+
P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.	+	+	+
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.			+

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
Всього	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

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

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

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійна робота
Частина 1 Теоретичне навчання				
1	Вступ. Тема 1 Вступ. Загальні підходи до побудови комп'ютерних моделей та їх формалізації.	1		2
2	Тема 2. Різницеві похідні та точність комп'ютерного моделювання. Розв'язання диференціальних рівнянь першого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	1		2
3	Тема 3. Розв'язання диференціальних рівнянь другого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	2		4
4	Тема 4. Розв'язання крайових задач. Метод стрільби та метод скінченних різниць.	2		4
5	Тема 5. Розв'язання систем диференціальних рівнянь. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність. Стаціонарні стани системи. Поняття тригера.	2		4
6	Тема 6. Загальні підходи до розв'язання диференціальних рівнянь у частинних похідних. Зв'язані коливні системи. Перехід від системи рівнянь що описує зв'язані осцилятори до хвильового рівняння. Моделювання хвиль.	2		4
7	Тема 7. Фур'є аналіз. Швидке перетворення Фур'є. Вейвлет аналіз.	2		4
8	Тема 8. Поняття про метод Монте-Карло. Генератори випадкових чисел. Генерація числових послідовностей с заданим законом розподілу ймовірностей. Похибки при моделюванні методом Монте-Карло.	2		4
9	Тема 9. Системи «реакція-дифузія» в природничих науках та їх моделювання. Утворення порядку з хаосу.	2		4
10	Тема 10. Чисельне інтегрування. Розв'язання інтегральних рівнянь.	2		4
11	Тема 11. Перколяція. Фрактали. Клітинні автомати. Письмова тестова робота.	2		4
Частина 2 Практичні заняття				
12	Тема 12. Застосування різницевої схеми до розв'язання диференціальних рівнянь в природничих науках.		4	2
13	Тема 13. Моделювання випадкових процесів. Застосування методу Монте-Карло до розв'язання практичних завдань та моделювання процесів в природничих науках.		6	4
14	Тема 14. Моделювання систем «реакція-дифузія».		6	4
15	Тема 15. Застосування комп'ютерного моделювання до описання та дослідження систем в природничих науках.		4	30
	ВСЬОГО	20	20	80

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекцій – 20 год.

Практичні заняття - 20 год.

Самостійна робота - 80 год.

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Harvey Gould, Jan Tobochnik, Wolfgang Christian «An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications To Physical Systems», 2006

Додаткова:

2. Martin Oliver Steinhauser «Computer Simulation in Physics and Engineering»
3. Philipp Scherer «Computational Physics: Simulation of Classical and Quantum Systems»

10. Додаткові ресурси:

1. <https://diveintopython3.problemsolving.io/>
2. <https://www.scipy.org/>
3. <https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-computational-physics>