

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет  
(назва факультету)

Кафедра молекулярної фізики



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ<sup>1</sup>**  
**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ ФІЗИЦІ**  
(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки  
(шифр і назва)  
спеціальність 104 Фізика та астрономія  
(шифр і назва спеціальності)  
освітній рівень бакалавр  
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)  
освітня програма Фізика  
(назва освітньої програми)  
спеціалізований  
вибірковий блок Молекулярна фізика  
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>5</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>3</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладачі: асистент Черевко Костянтин Володимирович  
(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 2022/2023 н.р. [підпис] [підпис] «30» 08 2022 р.  
(підпис, ПІБ, дата)

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

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

КИЇВ – 2021

<sup>1</sup> Робоча програма навчальної дисципліни є нормативним документом вищого навчального закладу і містить виклад конкретного змісту навчальної дисципліни, послідовність, організаційні форми її вивчення та їх обсяг, визначає форми та засоби поточного і підсумкового контролю.

Розробники<sup>2</sup>: Черевко Костянтин Володимирович, кандидат фіз.-мат. наук,  
асистент кафедри молекулярної фізики  
(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис)

(Булавін Л.А.)

(прізвище та ініціали)

Протокол №\_ від \_\_\_\_\_ 2021 р.

**Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету**

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис)

(Оліх О.Я.)

(прізвище та ініціали)

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 року

<sup>2</sup> Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

Розробники<sup>2</sup>: Черевко Костянтин Володимирович, кандидат фіз.-мат. наук,  
асистент кафедри молекулярної фізики  
(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис)

(Булавін Л.А.)

(прізвище та ініціали)

Протокол №\_ від \_\_\_\_\_ 2021 р.

**Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету**

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис)

(Оліх О.Я.)

(прізвище та ініціали)

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 року

---

<sup>2</sup> Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – оволодіння сучасними методами комп'ютерного моделювання та основними застосуваннями цих методів при постановці та інтерпретації числових експериментів з дослідження властивостей рідин, полімерів та фазових переходів в них .

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

1. Знати і вміти застосовувати базові чисельні методи для розв'язку диференціальних рівнянь, систем лінійних рівнянь, знаходження інтегралів.
2. Вміти застосовувати попередні знання з курсів математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, лінійної алгебри, класичної механіки для розв'язку систем лінійних рівнянь і рівнянь у частинних похідних, знаходження похідних складних функцій, запису гамільтоніана системи, знаходження екстремумів функцій, представлення функцій у вигляді рядів.
3. Володіти початковими навичками написання програм однією з поширених мов програмування.

**3. Анотація навчальної дисципліни / референс:**

Предмет навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання в молекулярній фізиці» включає роль комп'ютерного моделювання в рідинах та рідинних системах, основні методи перевірки надійності даних, що їх отримано в комп'ютерному моделюванні, положення методів комп'ютерних експериментів. Мета вивчення дисципліни - отримання глибоких та систематичних знань, які стосуються сучасних методів комп'ютерного моделювання та основними застосуваннями цих методів при постановці та інтерпретації числових експериментів з дослідження властивостей рідин, полімерів та фазових переходів в них. Навчальна задача курсу полягає у засвоєнні студентами основних методів комп'ютерного експерименту, застосування цих методів для проведення модельних числових експериментів з дослідження властивостей рідин, полімерів та фазових переходів в них. Результати навчання полягають в умінні проводити критичний аналіз задачі, умінні побудувати релевантні моделі явища, визначити числові алгоритми, що відповідають фізичним основам комп'ютерного експерименту. Методи викладання: лекції, лабораторні роботи. Методи оцінювання: опитування в процесі лекції, оцінки за захист лабораторних робіт, контрольні роботи після основних розділів курсу, залік. Підсумкова оцінка виставляється на основі проміжних оцінок (80%) та заліку (20%).

**4. Завдання (навчальні цілі)** – ознайомити студентів з основними методами комп'ютерного моделювання в дослідженнях властивостей рідин, полімерів та фазових переходів в них та навчити застосуванню цих методів при постановці та інтерпретації відповідних числових експериментів.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Фізика», спеціальність 104 «Фізика та астрономія»), ОНП «Фізика» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Загальних:

- ЗК3. Навички використання інформаційних та комунікаційних технологій.

Фахових:

- ФК5. Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем.
- ФК6. Здатність моделювати фізичні системи та астрономічні явища та процеси.

**5. Результати навчання за дисципліною:** (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основні джерела походження похибок і невизначеностей в комп'ютерному експерименті та методи дослідження їх розповсюдження.	<i>лекції</i>	<i>Модульна контрольна робота, опитування</i>	10
1.2	Знати основні методи верифікації та валідації комп'ютерних експериментів.	<i>лекції</i>	<i>Модульна контрольна робота, опитування</i>	10
1.3	Оволодіння основним поняттями та методами комп'ютерного експерименту для дослідження властивостей рідин, полімерів та фазових переходів в них.	<i>лекції</i>	<i>Модульна контрольна робота, опитування</i>	10
2.1	Вміти аналізувати фізичну задачу та будувати релевантні моделі явища, визначити числові алгоритми, що відповідають фізичним основам комп'ютерного експерименту.	<i>Лабораторні роботи</i>	<i>Захист лабораторних робіт</i>	35
2.2	Вміти інтерпретувати результати числових експериментів з дослідження властивостей рідинних систем та проводити оцінку надійності даних, що їх отримано в комп'ютерному моделюванні.	<i>Лабораторні роботи</i>	<i>Захист лабораторних робіт</i>	35

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання** (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2
<b>Програмні результати навчання</b>					
ПРН4. Вміти застосовувати базові математичні знання, які використовуються у фізиці та астрономії: з аналітичної геометрії, лінійної алгебри, математичного аналізу, диференціальних та інтегральних рівнянь, теорії ймовірностей та математичної статистики, теорії груп, методів математичної фізики, теорії функцій комплексної змінної, математичного моделювання	+			+	
ПРН9. Мати базові навички проведення теоретичних та/або експериментальних наукових досліджень з окремих спеціальних розділів фізики або астрономії, що виконуються індивідуально (автономно) та/або у складі наукової групи		+			
ПРН16. Мати навички роботи із сучасною обчислювальною технікою, вміти використовувати стандартні пакети прикладних програм і програмувати на рівні, достатньому для реалізації чисельних методів розв'язування фізичних задач, комп'ютерного моделювання фізичних та астрономічних явищ і процесів, виконання обчислювальних експериментів			+		+

**7. Структура курсу**

Курс складається з 2-х змістових модулів: «Виникнення і поширення похибок», який включає в себе 4 лекції, 4 лабораторні роботи та «Комп'ютерне моделювання рідин, полімерів та фазових переходів в них», який складається з 4 лекцій, 4 лабораторних робіт.

**8. Схема формування оцінки:**

**8.1 Форми оцінювання студентів:** (зазначається перелік видів робіт та форм їх контролю / оцінювання із зазначенням *Min.* – рубіжної та *Max.* кількості балів чи відсотків)

**- семестрове оцінювання:**

1. Опитування під час першого змістового модуля (5 балів).
2. Модульна контрольна робота 1 (15 балів).
3. Захист лабораторних робіт (20 балів).
1. Опитування під час другого змістового модуля (5 балів).
2. Модульна контрольна робота 2 (15 балів).
3. Захист лабораторних робіт (20 балів).

**- підсумкове оцінювання у формі заліку (20 балів).**

	ЗМ1/Частина 1 (за наявності)	ЗМ2/Частина 2 (за наявності)	Залік	Підсумкова оцінка
<i>Мінімум</i>	<u>25</u>	<u>25</u>	<u>10</u>	<u>60</u>
<i>Максимум</i>	<u>40</u>	<u>40</u>	<u>20</u>	<u>100</u>

у випадку комплексного екзамену слід вказати питому вагу складових

Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше 40 балів.<sup>3</sup>

<sup>3</sup> У випадку, коли дисципліна завершується екзаменом не менше – 20 балів, а рекомендований мінімум не менше 36 балів, оскільки якщо студент на екзамені набрав менше 24 балів (а це 60% від 40 балів, відведених на екзамен), то вони не додаються до семестрової оцінки незалежно від кількості балів, отриманих під час семестру, а в екзаменаційній відомості у графі «результуюча оцінка» переноситься лише кількість балів, отриманих під час семестру.

(слід чітко прописати умови, які висуваються викладачами даної дисципліни).

Оцінка за залік не може бути меншою **10 балів** для отримання загальної позитивної оцінки за курс.

**8.2 Організація оцінювання:** (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням, у тому числі, результатів навчання, опанування яких перевіряється конкретним оцінюванням).

#### Шкала відповідності

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

## СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні роботи	самостійна робота
<b>Частина 1. Виникнення і поширення похибок</b>				
1	<b>Тема 1. Вступ комп'ютерного моделювання.</b> Вступ. Предмет і задачі спецкурсу «Комп'ютерне моделювання в молекулярній фізиці». Роль комп'ютерного моделювання в фізичних дослідженнях. Принципові обмеження точності обчислень <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Десяткова та двійкова системи запису чисел.	2	2	7
2	<b>Тема 2. Похибки: природа і поширення.</b> Типи похибок. Поширення похибок в базових операціях. Особливості поширення похибок, пов'язані з обмеженістю розрядної сітки. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Рекурсивні алгоритми. Віднімання малих чисел	2	2	8
3	<b>Тема 3. Невизначеності в комп'ютерному моделюванні .</b> Класифікація невизначеностей. Етапи виникнення невизначеностей. Проходження невизначеностей через чисельний алгоритм. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Метод дискретизації в не детерміністичних задачах. Інтервальний аналіз	2	2	7
4	<b>Тема 4. Верифікація і валідація в комп'ютерному моделюванні</b> Поняття верифікації та валідації. Валідація комп'ютерної моделі. Верифікація алгоритмів. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Статистичний аналіз коду та динамічні тести.	1	1	6
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>			2
<b>Частина 2. Комп'ютерне моделювання рідин, полімерів та фазових переходів в них</b>				
5	<b>Тема 5. Основні методи комп'ютерного експерименту</b> Методи молекулярної динаміки та Монте-Карло. Розмір системи. Характерні часи для методу молекулярної динаміки. Обмеження і недоліки методів. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Розрахунок бінарної функції розподілу для системи частинок, які взаємодіють за допомогою потенціала Леннарда-Джонса.	2	2	7
6	<b>Тема 6. Задача про перколяцію. Фрактальна</b>	2	2	8

	<b>розмірність кластерів.</b> Алгоритм Копельмана-Хошена, китичні закони, критичні показники, радіус кореляції. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Дослідження переходу порядок – безпорядок в бінарній суміші.			
7	<b>Тема 7. Модель Ізінга.</b> Двовимірна та тривимірна модель Ізінга, обчислення критичних показників в моделі Ізінга. Тороїдальні граничні умови. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Дослідження фазового переходу за допомогою моделі Ізінга.	2	2	7
8	<b>Тема 8. Дослідження переходів «хаос-порядок» методами комп'ютерного експерименту.</b> Числа Фейгенбаума, числові відображення другого порядку, точка біфуркації. <b>с.р.с.</b> Вивчення матеріалу лекції. <b>Лаб. роб.</b> Визначення критичного показнику в моделі Ізінга.	1	1	6
	<b>Модульна контрольна робота 2</b>			2
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>15</b>	<b>15</b>	<b>60</b>

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

**Загальний обсяг 90 год.<sup>4</sup>**, в тому числі:

Лекцій – **15 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **0 год.**

Лабораторні заняття – **15 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації – **0 год.**

Самостійна робота – **60 год.**

<sup>4</sup> Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.



## РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА<sup>5</sup>:

*Основна: (Базова)*

1. Gould H., Tobochnik J., Christian W. An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications To Physical Systems. – CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017.
2. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids (Second Edition). – Oxford University Press, 2017.

*Додаткова:*

3. Morega A., Morega M., Dobre A. Computational Modeling in Biomedical Engineering and Medical Physics. – Academic Press, 2020
4. Mali O., Neittaanmaki P., Repin S. Accuracy Verification Methods: Theory and Algorithms. – Springer, 2014.
5. Kamberaj H. Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications (Scientific Computation). – Springer, 2020

---

<sup>5</sup> В тому числі Інтернет ресурси