

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка

Затверджено
Вченою радою фізичного факультету
«__»_____200__р.

Протокол №____
Голова вченої ради, декан

Проф. Макарець М.В.

Фізичний факультет
Кафедра молекулярної фізики

Доктор фізико-математичних наук,
Доцент Гаврюшенко Дмитро Анатолійович

Викладачі, що ведуть лабораторні заняття:
Доцент Гаврюшенко Дмитро Анатолійович
Доцент Григор'єв Андрій Миколайович
Асистент Мороз Костянтин Олександрович
Асистент Сенчуров Сергій Павлович

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ ТА МЕДИЧНІЙ ФІЗИЦІ

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ

для студентів 3-го курсу фізичного факультету
групи спеціалізації „Медична фізика” та „Молекулярна фізика”
спеціальності 6.070100

Затверджено
кафедрою молекулярної фізики
«__»_____200__р.

Протокол №____
Завідувач кафедри

Проф. Булавін Л.А.

КИЇВ-2008

ВСТУП

Дисципліна "Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці" є спеціальною дисципліною для спеціалізацій „медична фізика” та „молекулярна фізика”, що вивчається в п'ятому та шостому семестрах. Її обсяг становить **144** годин (**4** кредити за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS), в тому числі: **69** годин аудиторних занять (з них **35** годин лекцій і **34** годин практичних занять) та **75** години самостійної роботи. Формою підсумкового контролю є залік.

Мета і завдання навчальної дисципліни „Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці”: ознайомлення й оволодіння сучасними комп'ютерними методами та основними застосуваннями методів комп'ютерного моделювання у молекулярній фізиці та медичній фізиці, сприяння розвитку логічного й аналітичного мислення студентів.

Предмет навчальної дисципліни „Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці” включає основні методи та моделі комп'ютерного моделювання. Поняття, що вивчаються, ілюструються застосуваннями.

Вимоги до знань і вмінь. Знати: основні поняття методів комп'ютерного моделювання та чисельних методів, такі методи Монте-Карло, методи молекулярної динаміки, методи ренорм-групи.

Уміти: будувати комп'ютерні моделі, застосовувати методи комп'ютерного моделювання при розв'язуванні фізичних задач та набути навичок самостійного використання і вивчення літератури з комп'ютерних дисциплін.

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності. Навчальна дисципліна „Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці” є складовою циклу професійної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня „бакалавр”.

Система поточного і підсумкового контролю з навчальної дисципліни. Навчальна дисципліна „Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці” складається з 2 змістовних модулів і оцінюється за модульно-рейтинговою системою.

Для оцінювання знань студентів використовується 100-бальна шкала в кожному семестрі окремо.

Підсумковий контроль за семестр складається з суми балів, що отримав студент за кожен вид роботи на протязі семестру. Максимально можна отримати 30 балів в кожному семестрі.

Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю студент отримав менше ніж 35 балів (60% від максимальної кількості балів за два семестри), то студент не допускається до заліку і вважається таким, що не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни „Комп'ютерне моделювання в молекулярній та медичній фізиці”.

Контроль знань.

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

Оцінювання за формами контролю:

Поточний –

- | | |
|---|-----------|
| – Виконання домашніх завдань – | 10 балів; |
| – Участь у колоквиумах – | 10 балів; |
| – Виконання та здача лабораторних робіт – | 20 балів; |

Підсумковий контроль (залік)	60 балів.
-------------------------------------	------------------

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І СЕМІНАРСЬКИХ ЗАНЯТЬ

№ лекції	Назва лекції	Кількість годин			
		лекції	семінари/ лаборант., практичні	самоств. робота	інші форми контр.
Змістовий модуль 1					
1	Комп'ютерне моделювання. Похибки обчислення.	2		2	
2	Наближені методи побудови розв'язку диференціальних рівнянь. Сингулярно та регулярно збурені рівняння	2		2	
3	Методи Рунге-Кутти	2		2	
4	Вкладені методи Рунге-Кутти	2		2	
5	Багатокрокові методи	2		2	
6	Неявні методи побудови розв'язку диференціальних рівнянь	2		2	
7	Побудова розв'язку диференціальних рівнянь другого порядку	2		2	
8	Методи Монте-Карло	2		2	
9	Методи молекулярної динаміки	2		2	
КОЛОКВІУМ					
Оцінка за колоквіум					
Змістовий модуль 2					
9	Моделювання методами молекулярної динаміки мікроканончного ансамблю	2	2	6	
10	Моделювання методами молекулярної динаміки канончного ансамблю	2	2	6	
11	Методи Монте-Карло	2	2	8	
12	Задача про перколяцію. Фрактальна розмірність кластерів	2	2	7	
13	Модель Ізінга	2	2	6	
14	Модель гратчастого флюїду	2	2	6	
15	Дослідження переходів «хаос-порядок» методами комп'ютерного експерименту	2	2	6	
16	Дифузія кисню в плоско паралельній порі	2	2	6	
17	Дифузія кисню в циліндричній системі	2	2	6	
ЗАЛІК					
Оцінка за залік					
Оцінка за лабораторні роботи					
ВСЬОГО		35	34	75	

Загальний обсяг 144 год., в тому числі:
 лекції – 35 год.
 лабораторних робіт – 34 год.
 самостійна робота – 75 год.

ТЕМАТИЧНО – ЗМІСТОВНА ЧАСТИНА КУРСУ

Змістовний модуль 1

Лекція 1 Комп'ютерне моделювання. Похибки обчислення.

Представлення дійсних чисел. Похибки округлення та відкидання цифр в дискретному представленні.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1,2,3]

Лекція 2 Наближені методи побудови розв'язку диференціальних рівнянь. Сингулярно та регулярно збурені рівняння

Асимптотичні та чисельні методи, методи степеневих рядів.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [3,8]

Лекція 3 Методи Рунге-Кутти

Загальне визначення методів Рунге-Кутти. Представлення методів у вигляді таблиць

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [9]

Лекція 4 Вкладені методи Рунге-Кутти

Автоматичне керування довжиною кроку, методи Дормана-Принса

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [9]

Лекція 5 Багатокрокові методи

Методи Адамса, Міла-Сімсона

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [1,9]

Лекція 6 Неявні методи побудови розв'язку диференціальних рівнянь

Методи Рунге-Кутти. Багатокрокові методи. Схема «предиктор-корректор»

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [3,9]

Лекція 7 Побудова розв'язку диференціальних рівнянь другого порядку

Методи Мілна-Сімпсона. Багатокрокові методи.

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [2,9]

Лекція 8 Методи Монте-Карло та молекулярної динаміки

Приклади застосування методів Монте-Карло та молекулярної динаміки до типових задач молекулярної та медичної фізики

Завдання для самостійної роботи (2 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.

Література [5, 6]

Завдання для самостійної роботи

1. Побудова розв'язку сингулярно збуреного рівняння до 2-го порядку.
2. Побудова асимптотичного розв'язку рівняння Міхаеліса-Ментен.
3. Аналітичні методи розв'язання граничних задач.
4. Чисельні методи побудови розв'язку граничних задач.
5. Метод пристрілки.

Контрольні запитання та завдання

1. Похибка комп'ютерних обчислень. Накопичення похибки.
2. Сингулярно збурене диференціальне рівняння. Приклади з медичної та молекулярної фізики.
3. Загальне визначення методів Рунге-Кутти.
4. Явний метод Ейлера.
5. Явні та неявні методи.
6. Схема предиктор-корректор.
7. Багатокрокові методи.

Змістовний модуль 2

Лекція 9 Моделювання методами молекулярної динаміки мікроканончного ансамблю

Мікроканонічний ансамбль, функція розподілу, обчислення середніх за ансамблем.

Лабораторна робота 1. Побудова розв'язків систем звичайних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутта 4-го порядку (2 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 6]

Лекція 10 Моделювання методами молекулярної динаміки канончного ансамблю

Алгоритм Метрополіса, обчислення середніх за ансамблем.

Лабораторна робота 2. Застосування методу Рунге-Кутта за допомогою схеми предиктор-коректор (2 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 6]

Лекція 11 Методи Монте-Карло

Обчислення інтегралів за допомогою методів Монте-Карло.

Лабораторна робота 3. Побудова розв'язку сингулярно збурених диференціальних рівнянь (2 год).

Завдання для самостійної роботи (8 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 4, 6]

Лекція 12 Задача про перколяцію. Фрактальна розмірність кластерів

Алгоритм Копельмана-Хошена, китичні закони, критичні показники, радіус кореляції.

Лабораторна робота 4. Моделювання транспорту O_2 в коаксіальному циліндрі (2 год).

Завдання для самостійної роботи (7 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.

2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
 3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.
- Література* [5, 6]

Лекція 13 Модель Ізінга

Двовимірна та тривимірна модель Ізінга, обчислення критичних показників в моделі Ізінга. Тороїдальні граничні умови.

Лабораторна робота 5. Розрахунок бінарної функції розподілу для системи частинок, які взаємодіють за допомогою потенціала Леннарда-Джонса. Моделювання методом молекулярної динаміки (6 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 6]

Лекція 14 Модель гратчастого флюїду.

Критичні індекси та параметри взаємодії в моделі гратчастого флюїду, універсальність скейлінгових співвідношень.

Лабораторна робота 6. Дослідження впливу тороїдальних граничних умов на поведінку системи (2 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 6]

Лекція 15 Дослідження переходів «хаос-порядок» методами комп'ютерного експерименту.

Числа Фейгенбаума, числові відображення другого порядку, точка біфуркації.

Лабораторна робота 7. Дослідження фазового переходу за допомогою моделі Ізінга (6 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [5, 6]

Лекція 16 Дифузія кисню в плоско паралельній порі

Полегшена дифузія кисню та вуглекислого газу. Хімічні реакції при полегшеному транспорті.

Лабораторна робота 8. Визначення критичного показнику в моделі Ізінга (6 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [7]

Лекція 17 Дифузія кисню в циліндричній системі

Киснева заборгованість, умови виникнення кисневої заборгованості. Задача Стефана.

Лабораторна робота 9. Дослідження переходу порядок – безпорядок в бінарній суміші (6 год).

Завдання для самостійної роботи (6 год.)

1. Вивчення матеріалу лекції.
2. Опрацювання матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.
3. Оформлення звіту з лабораторної роботи.

Література [7]

Завдання для самостійної роботи

1. Перколяція. Алгоритм Копельмана-Хошена.
2. Перколяційний перехід як приклад геометричного фазового переходу.
3. Фрактальна розмірність кластерів, її зв'язок з критичними індексами.
4. Розрахункові задачі обчислення критичних індексів. Фрактальна розмірність у випадку 2-систем.
5. Визначення порогу перколяції.
6. Модель бінарного сплаву. Визначення критичної температури.
7. Модель гратчастого газу з урахуванням тороїдальних граничних умов.

Контрольні запитання та завдання

1. Методи Монте-Карло.
2. Методи молекулярної динаміки.
3. Тороїдальні граничні умов.
4. Модель Ізінга.
5. Модель гратчастого флюїду.
6. Критичні показники. Радіус кореляції в перколяційній моделі.
7. Перколяційна модель.
8. Нескінчений кластер в перколяційній моделі.
9. Фрактальна розмірність. Зв'язок з критичними показниками.
10. Числа Фейгенбаума.
11. Перехід «порядок-хаос».
12. Модель полегшеного транспорту крізь плоску мембрану.
13. Модель полегшеного транспорту в циліндричній системі.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Волков Е.А. Численные методы. М.: Наука, 1982.
2. Бахвалов Н.С. Численные методы. Т.1, 2. М.: Наука, 1975.
3. Ляшко И.И., Макаров В.Л. и др. Методы вычислений. К.: ВШ, 1977.
4. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1978.
5. Хеерман. Математический компьютерный эксперимент в теоретической физике. М.: Мир, 1990.
6. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т.1, 2. М.: Мир, 1990.
7. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. М.: Наука, 1994.
8. Васильев, Бутузов. Асимптотическое разложение сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973.
9. Хайрер, Нерсетт, Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнение. М.: Мир, 1990.