

**Санкт-Петербургский государственный университет**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Компьютерное моделирование I (молекулярная динамика)  
Computer Simulation I (Molecular Dynamics)

**Язык(и) обучения**

русский

Трудоемкость в зачетных единицах: 2

Регистрационный номер рабочей программы: 034146

## **Раздел 1. Характеристики учебных занятий**

### **1.1. Цели и задачи учебных занятий**

Изложить студентам физические основы и общие принципы методов компьютерного моделирования. Подробно ознакомить их с методом молекулярной динамики.

Сформировать у студентов представления о возможностях и пределах применимости данной методики для решения различных научно-исследовательских задач, а также навыки практического моделирования.

### **1.2. Требования подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)**

Знание слушателями курса "Статистическая физика" в объеме, читаемом в бакалавриате.

### **1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)**

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- понимать физические принципы, лежащие в основе методов компьютерного моделирования;
- знать метод молекулярной динамики;
- иметь навыки практического применения метода молекулярной динамики для решения научных задач.

### **1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий**

Практические занятия – 14 часов, консультация – 2 часа, экзамен – 2 часа.

## Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

### 2.1. Организация учебных занятий

#### 2.1.1 Основной курс

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																	
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа				Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)		
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																	
<b>Форма обучения: очная</b>																	
Семестр 2	16	10	2					2				15		27		14	2
	2-100	10-25	2-100					2-100				1-1		1-1			
<b>ИТОГО</b>	<b>16</b>	<b>10</b>	<b>2</b>					<b>2</b>				<b>15</b>		<b>27</b>			<b>2</b>

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>						
<b>Форма обучения очная</b>						
Семестр 2			экзамен, устно, традиционная форма	по графику промежуточной аттестации		

## **2.2. Структура и содержание учебных занятий**

### **Раздел 3. Обеспечение учебных занятий**

#### **3.1. Методическое обеспечение**

##### **3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины**

- при освоении разделов 1 и 4 практические занятия не предполагаются;
- при освоении разделов 2 и 3 основной упор должен быть сделан на практические занятия (соотношение лекционных часов и времени, отведенного на практические занятия, 1 к 2). К освоению раздела 4 следует приступать только после выполнения студентами всех упражнений/заданий;
- при проведении практических занятий не рекомендуется объединение студентов в пары и т.п., каждому студенту должна быть поставлена самостоятельная задача и предоставлен доступ к отдельному компьютеру/терминалу;
- самостоятельную работу необходимо проводить еженедельно, желательно в день проведения аудиторных занятий;
- при возникновении вопросов по итогам самостоятельной работы и/или практических занятий студентам необходимо обратиться с ними к преподавателю в начале ближайших аудиторных занятий.

##### **3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы**

- учебно-методические пособия;
- перечень заданий для самостоятельной работы.

##### **3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания**

##### **3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)**

##### **3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса**

#### **3.2. Кадровое обеспечение**

##### **3.2.1 Образование и (или) квалификация штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий**

Высшее образование, степень кандидата физико-математических наук.

##### **3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом**

При проведении практических занятий (14 часов) в компьютерном классе необходимо постоянное присутствие инженера, отвечающего за его работу.

#### **3.3. Материально-техническое обеспечение**

##### **3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий**

Стандартно оборудованная лекционная аудитория и компьютерный класс.

##### **3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования**

Видеопроектор, переносной экран.

##### **3.3.3 Характеристики специализированного оборудования**

В компьютерном классе должна быть установлена ОС «UNIX».

##### **3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения**

Не требуется.

##### **3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов**

Мел, фломастеры цветные, губки.

### **3.4. Информационное обеспечение**

#### **3.4.1 Список обязательной литературы**

Егоров А.В., Комолкин А.В., Компьютерное моделирование процессов ядерной магнитной релаксации, СПб, 2013

#### **3.4.2 Список дополнительной литературы**

1. Frenkel D., Smit B., Understanding molecular simulation. From algorithms to applications, Academic Press, 2002

2. Комолкин А.В., Шеляпина М.Г., Метод молекулярной динамики, СПб, 2007.

#### **3.4.3 Перечень иных информационных источников**

Нет.

### **Раздел 4. Разработчики программы**

Егоров Андрей Викторович, к.ф.-м.н, доцент, a.v.egorov@spbu.ru, 428-43-62