

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Механико-математический факультет
Кафедра инженерной механики и прикладной математики

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
_____/Ганиев Р.Ф./
«__» _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Метод событийного молекулярно-динамического моделирования

наименование дисциплины (модуля)

Уровень высшего образования:

Специалитет, подготовка кадров в аспирантуре

Направление подготовки (специальность):

Фундаментальные математика и механика

(код и название направления/специальности)

Направленность (профиль) ОПОП:

Механика жидкости, газа и плазмы

(если дисциплина (модуль) относится к вариативной части программы)

Форма обучения:

очная

(очная, очно-заочная)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
на заседании кафедры инженерной механики и прикладной математики
(протокол № _____, «__» _____ 20__ года)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности «Фундаментальные математика и механика» (программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки; программы специалитета; программы магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение _____

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО: *относится к вариативной части ОПОП ВО.*

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (если есть):

Освоение следующих дисциплин:

Математический анализ

Алгебра

Дифференциальные уравнения

Уравнения с частными производными

Основы механики сплошной среды

Основы кинетической теории газов

3. Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников (коды)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с компетенциями
ОПК-1 Готовность использовать фундаментальные знания в области механики сплошной среды в будущей профессиональной деятельности	Знать: <i>Основные положения, основные модели и методы механики сплошной среды и кинетической теории газов.</i> Уметь: <i>Решать задачи о течении разреженного газа.</i>
ПК-2 способность к самостоятельному анализу физических аспектов в классических постановках задач механики	Знать: <i>Знать основные модели механики сплошных сред и кинетической теории газов.</i> Уметь <i>Правильно выбирать модели и постановки задач для рассматриваемых явлений.</i>

4. Формат обучения **очный**

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе 36 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 32 академических часов на самостоятельную работу обучающихся.

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы			Самостоятельная работа обучающегося, часы <i>(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)</i>
		Занятия лекционного типа*	Занятия семинарского типа*	Всего	
Тема 1. Введение. Задачи динамики разреженного газа. Обзор существующих методов, преимущества и недостатки событийного подхода. История развития подхода событийного молекулярно-динамического моделирования. Обзор задач, которые удалось решить с помощью событийного подхода.	4	2	0	2	2
Тема 2. Основные положения событийного подхода. Понятие события, очередь событий. Модель молекулы. Модели межмолекулярных столкновений.	4	2	0	2	2
Тема 3. Граничные условия. Граничное условие на твердых поверхностях, модели рассеяния. Условия равновесия на открытых границах, моделирование	8	4	0	4	4

входящих и исходящих потоков на границе расчетной области. Периодические граничные условия. Расчетные области с подвижными границами.					
Тема 4. Особенности программной реализации событийного подхода. Сравнение вариантов реализации очереди событий. Хеш-функция и хеш-таблица. Расчет предстоящих событий. Задача многих тел и разбиение пространства на подобласти. Скорость счета и выбор оптимальных параметров. Независимость результатов расчетов от выбора технических параметров. Примеры программной реализации и примеры расчетов.	8	4	0	4	4
Тема 5. Особенности программной реализации алгоритмов, которые непоследовательно обращаются к оперативной памяти. Особенности реализации структур данных и других приемов по ускорению счета.	4	2	0	2	2
Коллоквиум по темам 1–5	2				2
Тема 6. Расчет полей макропараметров. Сетка для осреднения по пространству. Осреднение по времени. Осреднение по ансамблю. Расчет потоков основных термодинамических величин. Варианты реализации вывода результатов. Знакомство с открытым форматом VTK и средством визуализации Paraview.	8	4	2	6	2
Тема 7. Практические занятия: решение классических задач динамики разреженного газа методом событийного молекулярно-динамического моделирования. Создание расчетной области, задание граничных условий на твердых и открытых границах. Задание начальных условий. Запуск расчета на локальной машине. Подключение к	12	0	6	6	6

суперкомпьютерным ресурсам МГУ, запуск расчетов на кластере. Визуализация результатов.					
Тема 8. Моделирование течения смеси газов. Модели столкновения двухатомных молекул (на примере воздушной смеси). Вращательная температура. Задача об истечении азота в вакуум.	4	2	0	2	2
Тема 9. Обзор актуальных задач, требующих решения. Постановка задач студентам для самостоятельного решения и закрепления полученных навыков. Самостоятельная работа студентов.	8	2	0	2	6
Промежуточная аттестация: экзамен и защита результатов самостоятельной работы.	4				4
Итого	72	36			36

**Внимание! В таблице должно быть зафиксировано проведение текущего контроля успеваемости, который может быть реализован, например, в рамках занятий семинарского типа.*

*** Часы, отводимые на проведение промежуточной аттестации, выделяются из часов самостоятельной работы обучающегося*

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

1. Коллоквиум по темам 1–5:

1.1. Описать, в чем состоят принципиальные отличия событийного подхода (EDMD) от метода прямого статистического (DSMC) и классического молекулярно-динамического (MD) моделирования. Какие преимущества событийного подхода?

1.2. Ввести основные понятия событийного молекулярно-динамического моделирования: события, очередь событий, модель молекулы и т.п.

1.3. Особенности реализации очереди событий, подход с хеш-таблицей.

1.4. Задача многих тел в методе событийного моделирования. Разбиение на подобласти. Оптимальные значения технических параметров расчета.

1.5. Постановка граничных условий на твердых поверхностях и открытых границах расчетной области.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

1. Список билетов к экзамену:

1. Введение. Задачи динамики разреженного газа. Обзор существующих методов, преимущества и недостатки событийного подхода.

2. История развития подхода событийного молекулярно-динамического моделирования. Обзор задач, которые удалось решить с помощью событийного подхода.

3. Основные положения событийного подхода. Понятие события, очередь событий. Модель молекулы. Модели межмолекулярных столкновений.

4. Граничные условия. Граничное условие на твердых поверхностях, модели рассеяния. Условия равновесия на открытых границах, моделирование входящих и исходящих потоков на границе расчетной области.

5. Периодические граничные условия.

6. Расчетные области с подвижными границами.

7. Особенности программной реализации событийного подхода. Сравнение вариантов реализации очереди событий. Хеш-функция и хеш-таблица. Расчет предстоящих событий.

8. Задача многих тел и разбиение пространства на подобласти. Скорость счета и выбор оптимальных параметров. Независимость результатов расчетов от выбора технических параметров.

9. Особенности программной реализации алгоритмов, которые непоследовательно обращаются к оперативной памяти. Особенности реализации структур данных и других приемов по ускорению счета.

10. Макропараметры. Сетка для осреднения по пространству. Осреднение по времени. Осреднение по ансамблю. Расчет потоков основных термодинамических величин.

11. Моделирование течения смеси газов. Модели столкновения двухатомных молекул (на примере воздушной смеси). Вращательная температура. Задача об истечении азота в вакуум.

2. Защита результатов самостоятельной работы.

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ результатов обучения (РО) по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
РО и соответствующие виды оценочных средств				
Знания (виды оценочных средств: устные и письменные опросы и контрольные работы, тесты, и т.п.)	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения (виды оценочных средств: практические контрольные задания, написание и защита рефератов на заданную тему и т.п.)	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения, опыт деятельности) (виды оценочных средств: выполнение и защита курсовой работы, отчет по	Отсутствие навыков (владений, опыта)	Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта)	В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач

практике, отчет по НИР и т.н.)				
--------------------------------	--	--	--	--

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной литературы:
 - Конспект лекций
 - Материалы курса с примерами реализации метода
- Перечень лицензионного программного обеспечения (при необходимости):
Не требуется.
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:
Не требуется.
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости):
Сайт кафедры ИМППМ – <https://enmech.ru/courses>
- Описание материально-технического обеспечения:
 - Аудитория
 - Доска
 - Мел
 - Ноутбук или ПК
 - Проекционное оборудование (экран, проектор)

9. Язык преподавания:

Русский

10. Преподаватель (преподаватели):

Доцент, к.ф.-м.н. Якунчиков Артем Николаевич

11. Автор (авторы) программы:

Доцент, к.ф.-м.н. Якунчиков Артем Николаевич