

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Филиал Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова
в городе Сарове

УТВЕРЖДАЮ

Директор филиала МГУ в городе
Сарове

 /В.В. Воеводин/

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Вычислительные методы молекулярной динамики

Уровень высшего образования:

магистратура

Направление подготовки (специальность):

01.04.02 "Прикладная математика и информатика"

Направленность (профиль) ОПОП:

"Вычислительные методы и методика моделирования"

"Суперкомпьютерные технологии математического моделирования и обработки данных"

Форма обучения:

Очная

Саров 2021

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки по направлениям 01.04.02 «Прикладная математика и информатика» в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

1. НАИМЕНОВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительные методы молекулярной динамики

2. УРОВЕНЬ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Подготовка научно-педагогических кадров в магистратуре.

3. НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ, НАПРАВЛЕННОСТЬ (ПРОФИЛЬ) ПОДГОТОВКИ

Направление 01.04.02 «Прикладная математика и информатика». Направленность (профиль) "Вычислительные методы и методика моделирования", "Суперкомпьютерные технологии математического моделирования и обработки данных".

4. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОСНОВНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина входит в вариативную часть магистерской образовательной программы «Численные методы и математическое моделирование», изучается в 3-м семестре.

5. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

Дисциплина участвует в формировании следующих компетенций образовательной программы:

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения
-------------------------	---------------------------------

<p>Способность формулировать эффективные алгоритмы численного решения задачи Коши для гамильтоновых систем, в том числе для уравнений молекулярной динамики (СПК-36)</p>	<p>31 (СПК-36) Знать: важнейшие свойства решений задачи Коши для гамильтоновых систем, основной набор численных методов, предназначенных для получения приближенных решений задачи, и их свойства</p> <p>У1 (СПК-36) Уметь формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p> <p>В1 (СПК-36) Владеть навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>
--	---

Оценочные средства для промежуточной аттестации приведены в Приложении.

6. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет 4 зачетные единицы, всего 144 часа.

54 часа составляет контактная работа с преподавателем – 34 часа занятий лекционного типа, 16 часов занятий семинарского типа (семинары, научно-практические занятия, лабораторные работы и т.п.), 0 часов индивидуальных консультаций, 1 час групповых консультаций, 3 час мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

90 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. ВХОДНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Учащиеся должны владеть знаниями по математическому анализу, линейной алгебре, дифференциальным уравнениям, численным методам в объеме, соответствующем основным образовательным программам бакалавриата по укрупненным группам направлений и специальностей 01.00.00 «Математика и механика», 02.00.00 «Компьютерные и информационные науки».

8. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются пакет прикладных программ MATLAB, элементы дистанционных технологий обучения (выложенные в сети тексты научных статей и объектно-ориентированные компьютерные программы)

9. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В курсе излагаются вычислительные методы классической молекулярной динамики, как необходимый инструмент для проведения вычислительных экспериментов в области междисциплинарных исследований на современных вычислительных машинах. Основная математическая модель, рассматриваемая в курсе, основана на системе гамильтоновых обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих эволюцию состояния множества взаимодействующих материальных точек. Такие системы используются для описания атомно-молекулярного движения, движения небесных тел и космических аппаратов. Решения задачи Коши для этих систем обладают рядом глобальных свойств с глубоким геометрическим и физическим содержанием. Основное внимание уделяется вопросам сохранения вычислительными методами максимального числа глобальных свойств точных решений задачи Коши. К таким свойствам относятся симплектичность преобразования начального состояния в текущее состояние, обратимость во времени, консервативность, симметрия. Знания, приобретенные при изучении материала курса, полезны для разработки новых эффективных вычислительных методов молекулярной динамики и при решении актуальных задач в области междисциплинарных исследований.

...

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы					Самостоятельная работа учащегося, часы			
		из них					из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости: коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего

<p>Тема 1. Иерархическая система математических моделей для описания атомно-молекулярного движения.</p> <p>Свободное множество атомных ядер и электронов. Потенциальная энергия взаимодействий. Состояние микросистемы. Волновая функция. Оператор Гамильтона. Уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера. Уравнения для ядерной и электронной подсистем. Уравнения классической молекулярной динамики в форме Ньютона и форме Гамильтона.</p>	4	2	-	-	-	-	2	2	-	2
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

<p>Тема 2. Математические модели классической молекулярной динамики</p> <p>Свободное множество взаимодействующих материальных точек. Состояние множества. Дифференциальные уравнения движения свободного множества материальных точек. Потенциальная энергия взаимодействия. Парциальные потенциалы взаимодействия. Парное взаимодействие. Многочастичное взаимодействие. Короткодействующие потенциалы. Радиус обрезания. Процедуры обрезания. Нулевое значение полного количества движения. Периодические граничные условия. Вычисление кинетической температуры и давления. Теорема вириала.</p>	10	4	1	-	-	1	6	4	-	4
--	-----------	---	---	---	---	---	----------	---	---	----------

<p>Тема 3. Глобальные свойства решений задачи Коши для гамильтоновых уравнений.</p> <p>Симплектичность отображения начального состояния в текущее состояние. Теорема Пуанкаре. Сохранение фазового объема. Теорема Лиувилля. Сохранение первых интегралов (полного количества движения, полного момента количества движения, полной энергии). Дополнительные законы сохранения, вызванные симметрией потенциальной энергии. Обратимость во времени.</p>	6	2	1	-	-	1	4	2	-	2
--	----------	---	---	---	---	---	----------	---	---	----------

<p>Тема 4. Малые множества взаимодействующих материальных точек</p> <p>Минимальное свободное множество. Уравнения движения минимального свободного множества. Редукция уравнений движения. Уравнения движения точки в центральном поле. Задача Кеплера. Формулы движения пары взаимодействующих точек. Редукция задачи о движении точки в центральном поле. Геометрический смысл закона сохранения момента импульса в центральном поле. Второй закон Кеплера. Решение задачи в виде квадратур. Замкнутые и незамкнутые орбиты.</p>	11	4	1	-	-	1	6	5	-	5
---	-----------	---	---	---	---	---	----------	---	---	----------

<p>Тема 5. Задача Кеплера</p> <p>Задача Кеплера в двумерной постановке. Глобальные свойства решений задачи.</p> <p>Следствия из законов сохранения вектора Лапласа-Рунге-Ленца и момента импульса.</p> <p>Параметризация и линеаризация задачи. Решение задачи Коши для линейной гамильтоновой системы. Параметрическое представление задачи Кеплера в виде комбинации элементарных функций. Линеаризация задачи Кеплера с помощью симплектической замены переменных.</p>	7	2	1	-	-	1	4	3	-	3
--	----------	---	---	---	---	---	----------	---	---	----------

<p>Тема 6. Задача трех тел. Солнечная система</p> <p>Постановка задачи о движении трех материальных точек. Уравнения относительного движения. Уравнения относительного движения в случае гравитационного потенциала.</p> <p>Формулы движения трех материальных точек.</p> <p>Частные решения Л. Эйлера и Ж. Лагранжа.</p> <p>Хореографические движения. Солнечная система. Солнце. Планеты земной группы. Планеты гиганты. Пояс астероидов. Пояс Койпера. Планетоиды. Облако Оорта. Коротко- и длиннопериодические кометы. Астероиды. Метеороиды. Космическая пыль. Космический мусор.</p>	4	2	-	-	-	-	2	2	-	2
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

<p>Тема 7. Дифференциально-алгебраические уравнения движения с геометрическими связями</p> <p>Геометрические связи их уравнения и следствия из этих уравнений. Твердое тело. Полимерная цепочка. Движение по твердой поверхности. Возможные и виртуальные перемещения. Степени свободы. Силы реакции. Идеальные связи. Множители Лагранжа. Сведение дифференциально-алгебраических уравнений к дифференциальным уравнениям движения свободного множества взаимодействующих материальных точек. Индекс дифференциально-алгебраических уравнений.</p>	10	4	2	-	-	-	6	4	-			4
--	-----------	----------	----------	---	---	---	----------	----------	---	--	--	----------

Тема 8. Методы Рунге-Кутты.

Постановка задачи о приближенном решении. Разностная сетка.

Разностные функции. S-стадийные методы Рунге-Кутты. Разрешающие уравнения.

Существование решений разрешающих уравнений. Отбор решения разрешающих уравнений.

Таблица Бутчера. Явные методы. Диагонально неявные методы.

Неявные методы.

Условия порядка аппроксимации.

Сопряженные методы.

Симметричные методы.

Симплектические методы. Симметрично-симплектические методы.

Первые интегралы методов. Сохранение линейных и квадратичных форм.

Симметрично-симплектические методы для гамильтоновых систем. Редукция разрешающих уравнений.

Силовая и скоростная формы редуцированных уравнений. Метод средней точки

12

4

3

-

-

1

8

4

-

4

<p>Тема 9. Методы Ньюстрема. Метод Верле. Разделенные методы Рунге-Кутты. Методы композиции.</p> <p>Таблица Бутчера для методов Ньюстрема. Условия симплектичности методов. Метод Верле. Свойства метода Верле. Определение разделенных методов. Разрешающие уравнения. Симплектический метод Эйлера. Метод Верле как разделенный метод Рунге-Кутты. Условия порядка аппроксимации. S-этапные методы композиции. Условия повышения порядка аппроксимации. Симметричные методы. Трехэтапный метод. Пятиэтапный метод.</p>	10	2	-	-	-	1	3	7	-	7
---	-----------	---	---	---	---	---	----------	---	---	----------

<p>Тема 10. Консервативные методы.</p> <p>Метод дискретного градиента. Метод нулевого дисбаланса полной энергии. Метод минимального дисбаланса полной энергии. Результаты тестовых испытаний.</p>	14	4	-	1	-	-	5	9	-	9
<p>Тема 11. Проблемы автоматического выбора шага.</p> <p>Правило Рунге. Формула выбора шага. Параметризация задачи. Симплектическое интегрирование.</p>	11	2	-	-	-	1	3	8	-	8

Тема 12. Адаптивные симплектические консервативные методы решения задачи Кеплера.											
Параметризации решения задачи. Методы второго, четвертого и шестого порядка точности. Точный метод. Результаты тестовых испытаний методов. Сохранение первых интегралов и орбиты движения.	9	4	-			1	5	4	-	4	
Промежуточная аттестация – практическое контрольное задание + индивидуальное собеседование	45	-	-	1	-	8	9	36	-	36	
Итого	144						54				90

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ УЧАЩИХСЯ

Самостоятельная работа учащихся состоит в изучении лекционного материала, учебно-методической литературы, подготовки к практическим заданиям текущего контроля и промежуточной аттестации. Примеры конкретных практических самостоятельных работ приводятся ниже.

11. РЕСУРСНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Основная учебно-методическая литература

- 1) E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner. Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. Springer Series in Computational Mathematics 31, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2002, 2004, 2006, 644 p.
- 2) В. И. Арнольд. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979, 431.
- 3) Г. Г. Еленин, Т. Г. Еленина. Об одном однопараметрическом семействе разностных схем для численного решения задачи Кеплера. ЖВМиМФ, т. 55, № 8, с. 1292-1298, 2015.
- 4) Г. Г. Еленин, Т. Г. Еленина. Адаптивные симплектические консервативные численные методы решения задачи Коши. Дифференциальные уравнения, т. 53, № 7, 2017.
- 5) Е. М. Пестряев. Молекулярная динамика на персональном компьютере. http://www.rusoil.net/pages/14246/Pestryaev_%20Molek.dinamica.pdf

Дополнительная учебно-методическая литература

- 1) В. Б. Андреев. Численные методы. М.: МАКС Пресс, 2013, 336 с.
- 2) Э. Хариер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990, 512 с.
- 3) Г. Г. Еленин, И. И. Шляхов. Геометрическая структура пространства параметров симплектических методов Рунге-Кутты. Математическое моделирование, т. 23, № 5, с. 16 - 34, 2011
- 4) Х.Т. Холмуродов, М.В. Алтайский, И.В. Пузынин, Т. Дардин, Ф.П. Филипов. Методы молекулярной динамики для моделирования физических биологических процессов. Физика элементарных частиц и атомного ядра. т. 34, №26 474-515, 2003
- 5) Подкур М.Л., Подкур П.Н., Смоленцев Н.К. Программирование в среде Borland C++ Builder с математическими библиотеками MATLAB. — М.: ДМК Пресс, 2006. — 496 с.
- 6) Поршнева С.В. MATLAB 7. Основы работы и программирования. Учебник. — М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006. — 320 с.
- 7) Кривилев А.В. Основы компьютерной математики с использованием системы MATLAB. — М.: Лекс-Книга, 2005. — 496 с.

Лицензионное программное обеспечение, в том числе отечественного производства

При реализации дисциплины может быть использовано следующее программное обеспечение:

1. Программный продукт Red Hat Enterprise Linux Server for HPC Compute Node for Power, LE, Self-support 4 шт. №5540331
2. Программный продукт Red Hat Enterprise Linux Server for HPC Head Node for Power, LE, Standard 1 шт. №5540332
3. Операционная система SUSE Linux Enterprise Server 11 SP4 for x86_64 16 шт.
4. Операционная система Red Hat Enterprise Linux Server 5.0 for x86_64 14шт.
5. Операционная система SUSE Linux Enterprise Server 10 SP3 for ppc64 7 шт.
6. Операционная система Ubuntu 18.04.
7. Программное обеспечение для виртуализации Oracle VM VirtualBox

8. Операционная система ALTLinuxMATEStarterkit 9 лицензияGPL
9. Программный продукт JetBrains IntelliJ IDEA Community Edition Free Educational Licenses
10. Программный продукт JetBrains PyCharm Community Edition Free Educational Licenses
11. Программный продукт JetBrains CLion Community Edition Free Educational Licenses
12. Программный продукт UPPAAL (<http://www.uppaal.org/>) академическая лицензия
13. Программный продукт Java 8 (64-bit) Oracle Corporation
14. Программный продукт Java SE Development Kit 8(64-bit) Oracle Corporation
15. Программный продукт NetBeans IDE 8.2 NetBeans.org
16. Программный продукт Dev-C++ Bloodshed Software
17. Программный продукт CodeBlocks The Code::Blocks Team
18. Программный продукт Free Pascal 3.0.0 Free Pascal Team
19. Программный продукт Python 3.5.1 (64-bit) Python Software Foundation
20. Программный продукт R for Windows 3.2.2 R Core Team
21. Программный продукт Haskell Platform 7.10.3 Haskell.org
22. Операционная система Microsoft Windows 7 корпоративная академическая лицензия
23. Операционная система Microsoft Windows 10 Education академическая лицензия
24. Программный продукт Microsoft Project Professional 2013 академическая лицензия
25. Программный продукт Microsoft Visio Professional 2013 академическая лицензия
26. Программный продукт Microsoft Visual Studio Professional 2013 - RUS [Русский (Россия)] академическая лицензия

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. <http://www.edu.ru> – портал Министерства образования и науки РФ
2. <http://www.ict.edu.ru> – система федеральных образовательных порталов «ИКТ в образовании»
3. <http://www.openet.ru> - Российский портал открытого образования
4. <http://www.mon.gov.ru> - Министерство образования и науки Российской Федерации
5. <http://www.fasi.gov.ru> - Федеральное агентство по науке и инновациям

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

- 1) <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
- 2) <http://lammmps.sandia.gov>
- 3) <http://codeblue.umich.edu/hoomd-blue/>
- 4) <http://www.charmm.org>

Информационные технологии, используемые в процессе обучения

В процессе обучения используются пакет прикладных программ MATLAB.

Материально-техническая база

Для преподавания дисциплины требуется компьютерный класс, оборудованный маркерной или меловой доской. Компьютеры должны иметь доступ к пакету прикладных программ MATLAB и подключение к сети «Интернет».

12. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Русский

13. РАЗРАБОТЧИК ПРОГРАММЫ, ПРЕПОДАВАТЕЛЬ

д.ф.- м.н., профессор Еленин Георгий Георгиевич (elenin2@rambler.ru)

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Вычислительные методы молекулярной динамики»

Промежуточная аттестация состоит из двух этапов – выполнения практического контрольного задания, проверяющего приобретенные учащимся умения и навыки, и индивидуального собеседования, проверяющего приобретенные знания.

Средства для оценивания планируемых результатов обучения, критерии и показатели оценивания приведены ниже.

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ из соответствующих карт компетенций					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
	1	2	3	4	5	
	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	
31 (СПК-36) Знать: важнейшие свойства решений задачи Коши для гамильтоновых систем, основной набор численных методов, предназначенных для получения приближенных решений задачи, и их свойства	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о свойствах решений задачи Коши для гамильтоновых систем уравнений и об основных численных методах приближенного решения задачи	В целом сформированные, но неполные знания о свойствах решений задачи Коши для гамильтоновых систем уравнений и об основных численных методах приближенного решения задачи	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о свойствах решений задачи Коши для гамильтоновых систем уравнений и об основных численных методах приближенного решения задачи	Сформированные систематические знания о свойствах решений задачи Коши для гамильтоновых систем уравнений и об основных численных методах приближенного решения задачи	индивидуальное собеседование

<p>У1 (СПК-36) Уметь формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Фрагментарные умения формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p>	<p>В целом сформированное, но не систематическое умение формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p>	<p>Сформированное, но содержащее отдельные пробелы умение формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p>	<p>Сформированное систематическое умение формулировать и решать на ЭВМ базовые задачи о движении множества взаимодействующих материальных точек и визуализировать полученные результаты с помощью современных пакетов прикладных программ</p>	<p>практическое контрольное задание</p>
---	--------------------------	--	--	--	---	---

<p>В1 (СПК-36) Владеть навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное владение навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>	<p>В целом сформированное, но не систематическое владение навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>	<p>Сформированное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>	<p>Сформированное систематическое владение навыками выбора вычислительных методов исходя из предварительного анализа свойств решения задачи и конструирования удобного интерфейса для проведения вычислительных экспериментов</p>	<p>практическое контрольное задание</p>
---	---------------------------	--	--	--	---	---

Фонды оценочных средств

Примерные практические контрольные задания для текущего контроля успеваемости.

ПКЗ ТК1. Найти точное решение задачи Коши для гамильтоновой системы в виде комбинации элементарных функций.

Примерные варианты заданий:

- 1) Найти точное решение задачи Коши об одномерном движении материальной точки в поле потенциала Морсе.
- 2) Найти точное решение задачи Кеплера.

ПКЗ ТК2. Программно реализовать метод Верле для решения задачи об одномерном движении материальной точки в поле потенциала Морсе. Построить графики фазовой траектории и зависимости координаты, скорости, дефекта полной энергии, а также погрешности решения от времени.

Минимальные требования к графическому пользовательскому интерфейсу:

1. Главное окно.
2. Окно ввода параметров задачи и начальных условий и вывода значений полной энергии и периода финитного решения.
3. Кнопка выбора типа решения задачи – точное или приближенное.
4. Окно для задания параметров численного метода.
5. Окно для задания параметров сохранения результатов, остановки вычислений и имени файла с результатами расчетов.
6. Окно для выбора зависимостей фазовых переменных от времени и присвоения им цвета и стиля линий.
7. Кнопки «Вычислить». «Предыдущий результат».
8. Вывод графиков зависимостей выбранных фазовых переменных от времени, графика зависимости дефекта полной энергии от времени.

ПКЗ ТКЗ. Программно реализовать трехэтапный метод композиции на основе метода Верле для решения задачи об одномерном движении в поле потенциала Морсе. Сравнить точное и приближенные решения задачи.

Список вопросов для индивидуального собеседования на промежуточной аттестации.

- 1) Сформулировать задачу о динамике свободного множества взаимодействующих материальных точек.
- 2) Сформулировать задачу о динамике множества взаимодействующих материальных точек с геометрическими связями.
- 3) Дать определение гамильтоновой системы.
- 4) Дать определения линейного и нелинейного симплектического отображения. Как выглядит матрица Якоби двумерного симплектического отображения? Является ли переход от декартовых координат к полярным координатам на плоскости симплектическим отображением?
- 5) Доказать теорему Пуанкаре о симплектичности решения задачи Коши для гамильтоновых систем.
- 6) Доказать теоремы о сохранении полного импульса, полного момента импульса, полной энергии свободного множества взаимодействующих материальных точек.
- 7) Свести уравнения движения пары взаимодействующих материальных точек к задаче о движении виртуальной точки в центральном поле.
- 8) Сформулировать законы сохранения в задаче о движении в центральном поле. Объяснить геометрический смысл закона сохранения момента количества движения.
- 9) Сформулировать условия финитного и инфинитного движения в центральном поле.
- 10) Рассказать о замкнутых орбитах в задаче о движении в центральном поле.
- 11) Сформулировать задачу о движении трех тел. Привести решение Л. Эйлера.
- 12) Сформулировать задачу Кеплера и перечислить ее первые интегралы.
- 13) При каких условиях точка не падает на силовой центр?

- 14) Сформулировать задачу о движении трех тел. Привести решение Л. Эйлера.
- 15) Сформулировать задачу о движении трех тел. Привести решение Ж. Лагранжа.
- 16) Записать разрешающие уравнения методов Рунге-Кутты.
- 17) Сформулировать условия 1-, 2-, 3-, 4-го порядка аппроксимации методов Р-К.
- 18) Записать условия симметрии методов Р-К.
- 19) Какой одношаговый численный метод называется симплектическим?
- 20) Записать условия симплектичности методов Р-К.
- 21) Привести пример симметрично-симплектического одностадийного метода Р-К.
- 22) Какой порядок аппроксимации имеют двухстадийные симметрично-симплектические методы Р-К.
- 23) При выполнении каких условий трехстадийные симметрично-симплектические методы имеют 2-, 4-, 6-ой порядок аппроксимации.
- 24) При каких условиях методы Р-К сохраняют линейные формы?
- 25) При каких условиях методы Р-К сохраняют квадратичные формы?
- 26) Доказать теорему о сохранении линейных форм методами Р-К.
- 27) Доказать теорему о сохранении квадратичных форм методами Р-К.
- 28) Могут ли явные методы Р-К быть симплектическими?
- 29) Дать определение методам Ньюстрема. Сформулировать условия симплектичности методов Ньюстрема.
- 30) Могут ли явные методы Ньюстрема быть симплектическими?
- 31) Записать формулы метода Верле для уравнений движения с разделенной функцией Гамильтона.
- 32) Перечислить глобальные свойства приближенных решений, полученных методом Верле.
- 33) Записать формулы метода Верле для задачи Кеплера.
- 34) Дать определение методу дискретного градиента.
- 35) Записать уравнения метода дискретного градиента для задачи Кеплера.
- 36) Дать определение методу нулевого дисбаланса полной энергии.
- 37) Дать определение методам композиции и перечислить их основные свойства.
- 38) Параметризация решения и симплектическое интегрирование.
- 39) Привести пример адаптивного симплектического консервативного метода численного решения задачи Кеплера.
- 40) Перечислить несколько итерационных методов систем нелинейных уравнений неявных методов решения задачи Коши для гамильтоновых систем.

Примерное практическое контрольное задание для промежуточной аттестации.

ПКЗ ПА. Программно реализовать метод Верле, трехэтапный и пятиэтапный методы композиции на основе метода Верле для решения задачи Кеплера при $\gamma = 1.0$, $m_1 = m_2 = 1.0$. Построить графики орбиты и годографа скорости. Построить графики зависимости координат и скоростей, а также дефектов первых интегралов от времени. Графики строятся для приближенного и точного решений. Сравнить точности при-

ближенных решений, полученных различными методами.

Минимальные требования к графическому пользовательскому интерфейсу:

Главное окно.

Окно ввода параметров задачи и начальных условий и вывода значений первых интегралов, периодов финитных решений и времени обхода силового центра.

Кнопка выбора типа решения задачи – точное или приближенное.

Кнопка выбора численного метода для получения приближенного решения.

Окно для задания параметров численного метода.

Окно для задания параметров сохранения результатов, остановки вычислений и имени файла с результатами расчетов.

Окно для выбора конкретных проекций фазовой траектории на плоскость.

Окно для выбора зависимостей фазовых переменных от времени и присвоения им цвета и стиля линий.

Кнопки «Вычислить». «Предыдущий результат».

Вывод графиков на выбранных проекциях фазового пространства, графиков зависимостей выбранных фазовых переменных от времени, графиков зависимостей дефектов первых интегралов от времени и зависимости погрешностей от времени.

Примерные варианты заданий:

1) Начальные условия: $x_0 = 0.921$, $y_0 = 1.116$, $v_{x,0} = -0.029$, $v_{y,0} = 1.215$.

Контрольные значения: $T_t = 8.60332$, $T_\theta = 2.76887$, $\varepsilon = 0.757198$, $H^* = 0.64367$, $l_z = 1.08665$, $e_{LRL,x} = 0.12591$, $e_{LRL,y} = -1.50915$.

2) Начальные условия: $x_0 = 1.0$, $y_0 = 1.0$, $v_{x,0} = 0.1$, $v_{y,0} = 0.2$.

Контрольные значения: $T_t = 2.71338$, $T_\theta = 1.88474$, $\varepsilon = 0.99652$, $H^* = 1.38921$, $l_z = 0.1$, $e_{LRL,x} = -1.39421$, $e_{LRL,y} = -1.42421$.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Практическое контрольное задание для промежуточной аттестации является довольно объемным, поэтому частично выполняется в качестве четвертого задания для текущего контроля успеваемости. Выполнение каждого практического задания текущего контроля успеваемости может принести максимум 25 баллов, в итоге по результатам работы в семестре учащийся может набрать максимум 100 баллов. На промежуточной аттестации можно также набрать 100 баллов – 60 баллов максимум по итогам индивидуального собеседования и 40 баллов максимум за выполнение практического контрольного задания. Итоговая сумма, не меньшая 170, соответствует оценке «отлично», от 130 до 169 – оценке «хорошо», от 90 до 129 – оценке «удовлетворительно», меньшая 90 – оценке «неудовлетворительно».