

Белорусский государственный университет



Профессор по учебной работе

А.Л. Толстик

06 2017

Сертификационный № УД-4000 /уч.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В БИОФИЗИКЕ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности
1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий**

Минск 2017

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 04 01-2013 и учебных планов УВО №G31-163/уч. от 30.05.2013 г., №G31-174/уч. от 30.05.2013 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

П.М. Булай – доцент кафедры биофизики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой биофизики
физического факультета Белорусского государственного университета
(протокол № 15 от 02.06.2017);

Советом физического факультета
(протокол № 11 от 08.06. 2017 г.).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа учебной дисциплины «Компьютерный эксперимент в биофизике» разработана для специальности 1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий (специализация «Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии»).

Математические методы играют одну из ключевых ролей в биофизических исследованиях. Применение методов вычислительной математики при обработке экспериментальных результатов позволяет получать информацию о строении и функциональной динамике биологических объектов. Применение методов статистического моделирования в биофизике преследует две цели. С одной стороны, сравнение результатов расчетов с данными эксперимента, можно проверить насколько хорошо выбранная модель аппроксимирует реальную систему. С другой, – сравнивая результаты расчетов для выбранной модели с результатами различных аналитических теорий, можно проверить те или иные приближения, которые используются при аналитических исследованиях.

Основной целью курса является изучение общих подходов и методов компьютерного эксперимента в исследовании сложных биологических систем и рассмотрение с их помощью основных закономерностей динамического поведения биообъектов и самоорганизации.

Материал курса основан на базовых знаниях и представлениях, заложенных в общих курсах математической физики, теории дифференциальных уравнений, математического анализа, программирования и математического моделирования и др.

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать:

– основные представления о принципах моделирования биологических систем;

уметь:

– строить динамические модели биологических систем;

– решать задачи математической биофизики численными методами;

владеть:

– терминологией;

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций.

Академические компетенции:

1. Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения практических задач.

2. Владеть системным и сравнительным анализом.

3. Владеть исследовательскими навыками.

4. Уметь работать самостоятельно.

5. Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).

6. Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.
7. Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.
8. Обладать навыками устной и письменной коммуникации.
9. Уметь учиться, повышать свою квалификацию в течение всей жизни.

Социально-личностные компетенции:

1. Быть способным к социальному взаимодействию.
2. Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
3. Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
4. Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции:

1. Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики, современных технологий и материалов, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин.
2. Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационные образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов, научное оборудование и аппаратуру.
3. Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, системами автоматизированного программирования, научно-технической и патентной литературой.
4. Осуществлять поиск, систематизацию и анализ информации по перспективным направлениям развития отрасли, инновационным технологиям, проектам и решениям.
5. Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования, планирования, организации и ведения научно-исследовательской работы.

Общее количество часов, отводимое на изучение учебной дисциплины – 34, из них количество аудиторных часов – 20.

Форма получения высшего образования – очная, дневная,

Аудиторные занятия проводятся в виде лекций и аудиторного контроля управляемой самостоятельной работы (УСР) студентов. На проведение лекционных занятий отводится 16 часа, на УСР – 4 часа.

Занятия проводятся на 5-м курсе в 9-м семестре.

Формы текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. Интегрированный пакет математического моделирования MATLAB

Операционная среда системы Matlab. Командное окно. Инструментальная панель. Редактор/отладчик М-файлов. Рабочая область. Загрузка и сохранение. Список путей доступа. Работа с файлами. Импорт и экспорт данных. Использование памяти. Интерактивный доступ к справочной информации и документации.

Программирование в среде Matlab. Создание М-файлов. М-сценарии. М-функции. Выполнение М-функций. Списки аргументов. Типы аргументов. Типы данных. Операторы системы. Объединение операторов в арифметические выражения. Встроенные функции. Индексы и подиндексы. Вычисление строковых выражений. Ошибки и предупреждения. Время и даты. Ввод информации. Повышение эффективности обработки М-файлов. Функции управления памятью.

Многомерные массивы. Определение многомерного массива. Формирование многомерных массивов. Работа с многомерными массивами. Индексация. Переопределение размеров. Вычисления на многомерных массивах. Организация данных в многомерных массивах. Команды и функции обработки многомерных.

Пакеты расширения.

Тема 2. Интегрированный пакет физического моделирования Multiphysics.

Метод конечных элементов. Виды конечных элементов.

Общие принципы работы. Прикладные режимы. Процесс постановки и решения задачи. Среда Comsol Multiphysics. Навигатор моделей. Рабочая среда программы.

Задание областей. Рисование базовых геометрических объектов. Преобразования объектов. Логические операции с объектами. Аналитическое задание объектов.

Постановка задачи. Задание коэффициентов уравнения. Задание граничных условий.

Генерация сетки. Треугольная сетка. Четырёхугольные элементы. Выбор базисных функций.

Решение задачи. Стационарные решатели.

Визуализация результатов. Построение главного графика. Экспорт графика в файл. Построение графиков на сечениях и точках. Построение графиков на границах и в ключевых точках области.

Выражения и функции. Введение. Задание констант и регулярных выражений. Использование констант и регулярных выражений. Функции. Свойства осей и грида.

Практическое моделирование. Решение нестационарных задач. Постановка задачи. Решение задачи. Визуализация решения. Учёт начальных

условий задачи. Решение дифференциально-алгебраических систем уравнений.

Тема 3. Методы обработки экспериментальных данных.

Экспорт и импорт данных. Методы статистической обработки данных. Методы фильтрации сигналов. Интерполяция и аппроксимация данных. Разложение сигналов на компоненты. Определение параметров сигналов. Аппроксимация экспериментальных результатов системами динамических уравнений.

Тема 4. Методы построения компьютерных моделей.

Общие принципы построения кинетических моделей. Определение параметров модели. Постановка начальных и граничных условий. Решение систем дифференциальных уравнений. Методы исследования моделей. Проверка и апробация моделей. Методы визуализации результатов моделирования. Построение фазовых портретов моделей. Исследование эволюции фазовых портретов

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

| Номер раздела, темы | Название раздела, темы | Количество аудиторных часов | | | | | Количество часов УСР | Литература | Формы контроля знаний |
|---------------------|--|-----------------------------|----------------------|---------------------|----------------------|------|----------------------|------------|-----------------------|
| | | Лекции | Практические занятия | Семинарские занятия | Лабораторные занятия | Иное | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | | 7 | 8 | 9 |
| 1 | Интегрированный пакет математического моделирования MATLAB | | | | | | | [1,2,5] | |
| 1.1 | Назначение и области применения пакета Графический интерфейс пользователя Инструменты программирования пакета | 2 | | | | | | | |
| 1.2 | Математические инструменты пакета Инструменты обработки данных пакета Пакеты расширения | 2 | | | | | | | |
| 2 | Интегрированный пакет физического моделирования Multiphysics | | | | | | | [3] | |
| 2.1 | Назначение и области применения пакета Графический интерфейс пользователя Библиотека моделей пакета | 2 | | | | | | | |
| 2.2 | Средства и инструменты графических построений Методы решения и визуализации задач Построение и решением мультифизических задач | 2 | | | | | | | |
| 3 | Методы обработки экспериментальных данных | | | | | | 2 | [4,6] | Контрольная работа |
| 3.1 | Экспорт и импорт данных Методы статистической обработки данных | 2 | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|-----|---|-----------|--|--|--|----------|-------|--------------------|--|
| | Методы фильтрации сигналов | | | | | | | | |
| 3.2 | Интерполяция и аппроксимация данных Разложение сигналов на компоненты Определение параметров сигналов | 2 | | | | | | | |
| 4 | Методы построения компьютерных моделей | | | | | 2 | [1-6] | Контрольная работа | |
| 4.1 | Общие принципы построения кинетических моделей Определение параметров модели Постановка начальных и граничных условий Решение систем дифференциальных уравнений | 2 | | | | | | | |
| 4.2 | Методы исследования моделей Проверка и апробация моделей Методы визуализации результатов моделирования Построение фазовых портретов моделей Исследование эволюции фазовых портретов | 2 | | | | | | | |
| | Всего часов | 16 | | | | 4 | | зачет | |

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рекомендуемая литература

Основная

1. <http://matlab.exponenta.ru/>
2. В.Дьяконов «MATLAB 6: учебный курс» СПб.: Питер 2001
3. <http://www.comsol.com/>
4. С. Гланц «Медико-биологическая статистика» М: Практика 1999

Дополнительная

5. Н.Н. Мартынов, А.П. Иванов «MATLAB 5.X: Вычисление, визуализация, программирование» М: Кудиц-образ 2000
6. К. Дёрффель «Статистика в аналитической химии», М: Мир 1994

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

1. Контрольные работы по разделам дисциплины

Примерный перечень мероприятий для контроля качества усвоения знаний по учебной дисциплине

Рекомендуемые темы для составления тестовых и контрольных заданий по учебной дисциплине

1. Назначение и области применения пакета MATLAB
2. Графический интерфейс пользователя MATLAB
3. Инструменты программирования пакета MATLAB
4. Математические инструменты пакета MATLAB
5. Инструменты обработки данных пакета MATLAB
6. Пакеты расширения MATLAB
7. Назначение и области применения пакета Multiphysics
8. Графический интерфейс пользователя Multiphysics
9. Библиотека моделей пакета Multiphysics
10. Средства и инструменты графических построений Multiphysics
11. Методы решения и визуализации задач Multiphysics
12. Построение и решением мультифизических задач Multiphysics
13. Экспорт и импорт данных
14. Методы статистической обработки данных
15. Методы фильтрации сигналов
16. Интерполяция и аппроксимация данных
17. Разложение сигналов на компоненты
18. Определение параметров сигналов
19. Общие принципы построения кинетических моделей
20. Определение параметров модели
21. Постановка начальных и граничных условий
22. Решение систем дифференциальных уравнений

23. Методы исследования моделей
24. Проверка и апробация моделей
25. Методы визуализации результатов моделирования
26. Построение фазовых портретов моделей
27. Исследование эволюции фазовых портретов

Рекомендации по контролю качества усвоения знаний и проведению аттестации

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать тестовые и контрольные задания по разделам дисциплины. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Оценка каждой из контрольных работ должна быть не ниже 4 баллов, оценка ниже 4 баллов считается неудовлетворительной. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно.

Контрольные мероприятия проводятся в письменной форме. Каждая из контрольных работ включает тестовые задания и контрольные вопросы. На выполнение контрольной работы отводится 90 мин. Оценка каждой контрольной проводится по десятибалльной шкале.

Оценка текущей успеваемости рассчитывается как среднее оценок за каждую из письменных контрольных работ.

Текущий контроль по дисциплине (Т, максимум 10 баллов) включает 2 промежуточные письменные контрольные работы по различным темам раздела (максимум 10 баллов по каждой).

$$\text{Оценка текущего контроля } T = \frac{K_1 + K_2}{2}$$

Аттестация по учебной дисциплине проводится в форме зачета.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

| Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование | Название кафедры | Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине | Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола) |
|---|-------------------|---|---|
| Биофизика сложных систем | Кафедра биофизики | Замечаний нет | Изменение не требуется протокол №15 от 02.06.2017 |

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО
на ____ / ____ учебный год

| №№ пп | Дополнения и изменения | Основание |
|----------|------------------------|-----------|
| | | |

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
(протокол № ____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой
биофизики

академик, профессор _____

С.Н.Черенкевич

УТВЕРЖДАЮ

Декан физического факультета
д.ф.-м.н., профессор _____

В.М. Анищик