
УТВЕРЖДЕНА

Решением Ученого совета
АНО ВО «Центральный университет»
«25» мая 2026 г.
Протокол № 2

**Рабочая программа дисциплины (модуля)
«Статистическая физика и молекулярное моделирование»**

Направление подготовки: 02.04.01 Математика и компьютерные науки

Направленность (профиль) подготовки: III в биотехе

Специализация: Структурная биоинформатика

Квалификация (степень) выпускника: магистр

Форма обучения: очная

Срок освоения программы: 2 года

Год набора: 2026

**Москва
2026**

Содержание

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)	3
2. Перечень планируемых результатов обучения.....	5
3. Тематический план.....	8
4. Содержание дисциплины (модуля).....	8
5. Учебно-методическое обеспечение	10
6. Материально-техническое обеспечение	10
7. Методические и оценочные материалы	12

1. Краткая характеристика дисциплины (модуля)

Рабочая программа дисциплины (модуля) «Статистическая физика и молекулярное моделирование» составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – магистратура по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе, утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 810 от 23.08.2017 года.

Изучение дисциплины (модуля) «Статистическая физика и молекулярное моделирование» позволяет заложить физическую основу для корректного проведения и интерпретации молекулярно-динамических расчётов, что критически важно для моделирования белков, нуклеиновых кислот и их взаимодействий в реалистичных условиях.

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Настоящая дисциплина (модуль) включена в учебный план по программе подготовки магистратуры по направлению 02.04.01 Математика и компьютерные науки, профиль ИИ в биотехе и входит в обязательную часть Блока 1 как дисциплина по выбору, подлежащая обязательному изучению на специализации «Структурная биоинформатика».

Дисциплина (модуль) изучается на 1 курсе в 1 семестре.

Цель изучения дисциплины (модуля): формирование у обучающихся глубокого понимания физических основ молекулярного моделирования на основе законов статистической физики, а также развитие навыков применения математического аппарата для анализа термодинамических свойств и динамики биомолекулярных систем.

Задачи изучения дисциплины (модуля):

- изучить уравнения движения частиц и алгоритмы численного интегрирования, используемые в методе молекулярной динамики;
- освоить ключевые понятия статистической физики: статистические ансамбли, статистическая сумма, распределения Больцмана, Максвелла и Гиббса;
- научиться выводить термодинамические величины (энергию, энтропию, температуру, давление) из микроскопических моделей;
- понять принципы работы термостатов и баростатов и их роль в моделировании реальных условий;
- овладеть методами расчёта дальнедействующих электростатических взаимодействий и описания диффузионных процессов в молекулярной динамике.

В результате освоения дисциплины (модуля) обучающийся должен:

знать:

- уравнения движения частиц, используемые в методе молекулярной динамики; понятия статистической физики: статистического ансамбля (микростатистического, канонического), температуры как термодинамической величины; понятие стат. суммы; распределения (Больцмана, Максвелла, Гиббса) и вывод основных термодинамических величин.
- понятия термостата и баростата, их применение в методах молекулярной динамики.
- алгоритмы вычисления дальнедействующих электростатических взаимодействий в молекулярной динамике.

- алгоритмы численного интегрирования уравнений молекулярной динамики.
- описание диффузионных процессов в методе молекулярной динамики.

уметь:

- применять математический аппарат стат. физики для выбора параметров молекулярно-динамических расчетов, вывода основных термодинамических величин; разрабатывать протоколы проведения молекулярно-динамических расчетов.

владеть:

- методами статистической физики для объяснения понятий температуры, давления; понятийным аппаратом статистической физики.

2. Перечень планируемых результатов обучения

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) при проведении учебных занятий в форме контактной работы обучающихся с педагогическими работниками Университета и в форме самостоятельной работы обучающихся:

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)
УК-1.	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1.	Знает основные принципы системного подхода и методы критического анализа, а также теоретические основы стратегического планирования и принятия решений
		УК-1.2.	Умеет применять методы системного анализа для выявления ключевых проблемных ситуаций, формулировать гипотезы и разрабатывать альтернативные стратегии действий на основе полученных данных
		УК-1.3.	Имеет практический опыт в проведении анализа реальных проблемных ситуаций в рамках проектов, способен вырабатывать и обосновывать стратегии действий, учитывая различные аспекты и последствия
УК-2.	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.1.	Знает основные методологии управления проектами, ключевые этапы жизненного цикла проекта и инструменты для планирования и контроля
		УК-2.2.	Умеет разрабатывать проектную документацию, устанавливать цели и задачи проекта, а также эффективно распределять ресурсы и управлять рисками на всех этапах его реализации
		УК-2.3.	Имеет практический опыт в управлении реальными проектами, включая планирование, исполнение и завершение, а также в оценке результатов и проведении анализа успешности проекта
ПК-1.	Способен определять общие формы и закономерности области искусственного	ПК-1.1.	Знает основные теоретические концепции и принципы искусственного интеллекта в биотехнологии, а также методы

	интеллекта в биологии, медицине или биотехнологии, обрабатывать и интерпретировать данные биологических исследований		обработки, анализа и визуализации данных в биологии, медицине или биотехнологии
		ПК-1.2.	Умеет проводить систематический анализ области профессиональной деятельности, выявлять закономерности и тенденции, моделировать основные биологические процессы и интерпретировать полученные результаты с использованием методов биоинформатики и искусственного интеллекта
		ПК-1.3.	Имеет практический опыт работы в области искусственного интеллекта в биотехнологии, включая участие в научных проектах, исследованиях или практических заданиях
ПК-2.	Способен математически корректно ставить и решать естественнонаучные и прикладные задачи в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-2.1.	Знает основные методы математического моделирования и теоретические основы современной биологии и биоинформатики, необходимые для корректной постановки задач
		ПК-2.2.	Умеет формулировать математические модели биологических процессов, выбирать адекватные методы решения и интерпретировать результаты в профессиональном контексте
		ПК-2.3.	Имеет практический опыт постановки и решения прикладных задач с использованием методов ИИ в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-3.	Способен решать задачи профессиональной деятельности и применять методы искусственного интеллекта в прикладных и фундаментальных исследованиях в области биологии, медицины или биотехнологий	ПК-3.1.	Знает принципы и методы решения профессиональных задач, включая применение профильно-специализированных знаний в области ИИ для фундаментальных и прикладных исследований в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-3.2.	Умеет применять математические и компьютерные методы, формулировать результаты и анализировать их последствия для научных и практических решений

		ПК-3.3.	Имеет опыт участия в проектах, где методы ИИ применялись для решения исследовательских и прикладных задач в области биологии, медицины или биотехнологий
ПК-5.	Способен передавать результаты прикладных задач в виде профессиональных рекомендаций в области искусственного интеллекта, биоинформатики и биотехнологии	ПК-5.1.	Знает методы формулирования рекомендаций и терминологию области искусственного интеллекта и биоинформатики
		ПК-5.2.	Умеет интерпретировать результаты анализа и моделирования и формулировать рекомендации для практического применения в области биологии, медицины или биотехнологий
		ПК-5.3.	Имеет опыт разработки рекомендаций по результатам проектов в области искусственного интеллекта и биотехнологии

3. Тематический план

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Трудоемкость, академические часы				ТКУ (текущий контроль успеваемости)
		Очная форма				
		Аудиторная работа		Контроль	Самостояте льная работа	
		Лекции	Семинары (практичес кие занятия)			
1	Основы классической механики и статистической физики	10		1	20	Тест Коллоквиум
2	Термостаты, баростаты и условия моделирования в молекулярной динамике	10		1	20	Тест Коллоквиум
3	Учёт межмолекулярных взаимодействий и среды	5		1	17	Тест Коллоквиум
4	Кинетика и численные методы	5		1	17	Тест Коллоквиум
	Экзамен			6		
Итого:		30		10	74	
Объем дисциплины (модуля) (в ак. ч.)		114				
Объем дисциплины (модуля) (в зач. ед.)		3				

4. Содержание дисциплины (модуля)

№п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Содержание дисциплины (модуля) по темам
1	Основы классической механики и статистической физики	Введение. Методы статистической физики в применении к задачам молекулярного моделирования в биологии. Законы Ньютона как основа описания движения классических механических систем. Лагранжева формулировка классической механики. Гамильтониан системы и канонические уравнения Гамильтона. Термодинамика. Статистический ансамбль. Микроканонический ансамбль. Температура как термодинамическая величина в статистической физике. Канонический ансамбль. Канонический ансамбль. Стат. сумма, распределение Гиббса.
2	Термостаты, баростаты и условия моделирования в молекулярной динамике	Понятие термостата и его использование для поддержания постоянной температуры в методах молекулярной динамики. Методы поддержания заданного давления в молекулярной динамике и основные типы баростатов. Электростатические взаимодействия в молекулярной динамике.
3	Учёт межмолекулярных взаимодействий и среды	Проблема вычисления дальнедействующих электростатических взаимодействий в молекулярной динамике.

		Модели неявного растворителя в задачах молекулярного моделирования. Классическая модель Борна для энергии сольватации точечного заряда. Вывод выражения энергии сольватации в модели Борна.
4	Кинетика и численные методы	Первый и второй законы Фика как основа описания диффузионных процессов в конденсированных средах. Соотношение Эйнштейна. Численные методы интегрирования уравнений движения классических систем.

5. Учебно-методическое обеспечение

Университет располагает полным набором лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, включая продукты отечественного производства.

Каждый студент в течение всего периода обучения получает индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечной системе и электронной информационно-образовательной среде университета. Эти системы предоставляют возможность доступа к ресурсам из любой точки, где есть подключение к сети Интернет, как на территории университета, так и за его пределами.

Студентам обеспечен удаленный доступ к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам.

Основная литература:

1. Ефремов, Ю. С. Статистическая физика и термодинамика : учебник для вузов / Ю. С. Ефремов. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 209 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-05152-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/585743>.

2. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : монография / И. Г. Каплан ; пер. с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина ; под. ред. Н. Ф. Степанова. - 4-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2023. - 397 с. - ISBN 978-5-93208-648-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2032508>.

Дополнительная литература:

1. Костюков, В. В. Молекулярная механика биополимеров : монография / В.В. Костюков. — Москва : ИНФРА-М, 2025. — 140 с. — (Научная мысль). — DOI 10.12737/1010677. - ISBN 978-5-16-014913-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.ru/catalog/product/2178245>.

6. Материально-техническое обеспечение

Университет располагает материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работ обучающихся, предусмотренных учебным планом.

Помещения, которые представляют собой учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского (практического) типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования. Помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Изучение дисциплины (модуля) обеспечивается в учебных аудиториях, оснащенных:

- столами и стульями;
- компьютерной техникой;
- механическими калькуляторами;

— специализированным оборудованием, включая демонстрационное оборудование.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, в том числе приспособленные для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья, оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду Университета.

Обучающимся предоставляется доступ (в том числе удаленный) к ресурсам информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», электронным ресурсам (в том числе электронным библиотечным системам, современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам):

№	Наименование портала (издания, курса, документа)	Ссылка
1.	Научная электронная библиотека elibrary.ru библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp
2.	База данных для IT-специалистов	https://habr.com
3.	База данных ScienceDirect	https://www.sciencedirect.com
4.	Официальный сайт Министерства науки и высшего образования Российской Федерации	https://minobrnauki.gov.ru/
5.	Федеральный портал «Российское образование»	https://www.edu.ru/
6.	Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам"	http://window.edu.ru/
7.	Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов	http://school-collection.edu.ru/
8.	Федеральный центр информационно - образовательных ресурсов	http://fcior.edu.ru/

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), в том числе комплект лицензионного программного обеспечения, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

Наименование ПО	Производство	Лицензионное / свободно распространяемое
Операционные системы:		
Microsoft Imagine (Windows Client, Server)	зарубежное	лицензионное
Браузеры:		
Яндекс.Браузер	отечественное	свободно распространяемое
Google Chrome	зарубежное	свободно распространяемое
Офисные приложения:		
Microsoft Imagine (Visio, OneNote)	зарубежное	лицензионное
TeXstudio	зарубежное	свободно распространяемое
Adobe Acrobat Reader	зарубежное	свободно распространяемое
Программное обеспечение для планирования и учета времени:		
Toggle app	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления проектами:		
Microsoft Imagine (Project)	зарубежное	лицензионное

Системы управления базами данных:		
Microsoft Imagine (SQL Server)	зарубежное	лицензионное
Системы резервного копирования (backup):		
Acronis Backup Advanced for HyperV	зарубежное	лицензионное
Справочно-правовые системы:		
КонсультантПлюс: справочно-правовая система	отечественное	лицензионное
Средства антивирусной защиты:		
Kaspersky Endpoint Security для бизнеса Стандартный Russian Edition	отечественное	лицензионное
Среды разработки:		
Visual Studio Code	зарубежное	свободно распространяемое
Bash (Unix shell)	зарубежное	свободно распространяемое
Anaconda	зарубежное	свободно распространяемое
Robotic Operating System	зарубежное	свободно распространяемое
CopelliaSim	зарубежное	свободно распространяемое
Google Colaboratory	зарубежное	свободно распространяемое
Пакеты программных средств и библиотек:		
AutoPsy	зарубежное	свободно распространяемое
Interactive Disassembler (IDA)	зарубежное	свободно распространяемое
Системы управления библиографической информацией:		
Zotero	зарубежное	свободно распространяемое
Сервисы и службы:		
Bind	зарубежное	свободно распространяемое
Docker	зарубежное	свободно распространяемое

7. Методические и оценочные материалы

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

В процессе изучения дисциплины (модуля) «Статистическая физика и молекулярное моделирование» в рамках текущего контроля успеваемости используются такие виды учебной работы, как лекции, коллоквиум, тест, а также различные виды самостоятельной работы обучающихся по заданию преподавателя, направленные на развитие навыков профессиональной лексики, закрепление практических профессиональных компетенций, поощрение инициатив.

Лекция – систематическое, последовательное, монологическое изложение преподавателем учебного материала, как правило, теоретического характера.

В процессе лекций рекомендуется вести конспект лекций: кратко и схематично фиксировать основные идеи, выводы и обобщения лекции; выделять важные мысли, ключевые слова и термины. Необходимо отметить вопросы или материалы, которые вызывают затруднения, и попытаться найти ответы в рекомендованной литературе. Если разобраться в материале не удастся, следует сформулировать вопрос и задать его преподавателю на консультации или во время семинарского (практического) занятия.

Коллоквиум – устные ответы на вопросы, список которых известен студенту заранее.
Электронный документ

В процессе подготовки к коллоквиуму необходимо проанализировать учебные материалы, ознакомившись с лекциями, учебниками и дополнительными источниками, акцентируя внимание на ключевых темах. Рекомендуется создать структурированные конспекты, выделяя основные идеи, термины и формулы.

Тест – особая форма проверки знаний. Проводится после освоения одной или нескольких тем и свидетельствует о качестве понимания основных понятий изучаемого материала. Тестовые задания составлены к ключевым понятиям, основным разделам, важным терминологическим категориям изучаемой дисциплины.

Для подготовки к тесту необходимо знать терминологический аппарат дисциплины, понимать смысл научных категорий и уметь их использовать в профессиональной лексике. Владение понятийным аппаратом, включённым в тестовые задания, позволяет преподавателю быстро проверить уровень понимания студентами важных методологических категорий.

Самостоятельная работа – работа студентов, направленная на углубленное изучение отдельных тем и вопросов учебной дисциплины (модуля).

В процессе самостоятельной работы студенты взаимодействуют с рекомендованными материалами при минимальном участии преподавателя. Задачи студента включают работу с конспектами лекций (обработка текста), повторное изучение учебных материалов планов и тезисов ответов, изучение дополнительных тем, выполнение учебно-исследовательских заданий и другое.

Система оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Критерии получения уровня и оценивания сформированности компетенций по дисциплине (модулю) «Статистическая физика и молекулярное моделирование»

Оценивание уровня учебных достижений обучающихся по дисциплине (модулю) осуществляется в виде текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине (модулю) осуществляется в форме *экзамена*, при этом проводится оценка компетенций, сформированных по дисциплине.

Для оценивания текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации используется десятибалльная шкала оценивания, которая соотносится с традиционной пятибалльной шкалой следующим образом, если иное не указано в syllabus дисциплины:

Десятибалльная оценка	Пятибалльная оценка	Общая характеристика результата обучения по дисциплине (модулю)
10	Отлично	Студент полностью владеет знаниями, изложенными в рабочей программе, и глубоко осмысляет дисциплину (модуль). Он самостоятельно и логически последовательно отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее важном. Умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя ключевые моменты и устанавливая причинно-следственные связи. Четко формулирует ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования,
9	Отлично	
8	Отлично	

Десятибалльная оценка	Пятибалльная оценка	Общая характеристика результата обучения по дисциплине (модулю)
		необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты дисциплины (модуля) с практическими задачами.
7	Хорошо	Студент обладает знаниями предмета почти в полном объеме рабочей программы и самостоятельно, логически последовательно и всесторонне отвечает на все вопросы, акцентируя внимание на наиболее значимых моментах. Он умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделяя его ключевые аспекты и устанавливая причинно-следственные связи. Формулирует свои ответы, уверенно интерпретирует результаты анализов и других исследований, а также решает сложные ситуационные задачи. Студент хорошо знаком с методами исследования, необходимыми для практической деятельности, и умеет связывать теоретические аспекты предмета с практическими задачами.
6	Хорошо	
5	Удовлетворительно	Студент обладает базовыми знаниями по дисциплине (модулю), но испытывает трудности при самостоятельных ответах и использует неточные формулировки. В ходе ответов он допускает ошибки, касающиеся сути вопросов. Студент способен решать только самые простые задачи и владеет лишь минимальным набором методов исследования.
4	Удовлетворительно	
3	Не сдан	Студент не овладел обязательным минимумом знаний по предмету и не может ответить на вопросы, даже если преподаватель задает дополнительные наводящие вопросы.
2	Не сдан	
1	Не сдан	

Дисциплина (модуль) «Статистическая физика и молекулярное моделирование» оценивается следующим образом:

Активность	Вес	Количество	Описание
Коллоквиумы	40%	2	Устные ответы на вопросы, список которых известен студенту заранее
Тесты	20%	4	Форма проверки знаний студентов через ответы на вопросы с выбором из нескольких вариантов ответов
Экзамен	40%	1	Письменная или устная работа над заданием, направленным на проверку полученных знаний и навыков по дисциплине (модулю)

Формула расчёта итоговой оценки по дисциплине (модулю) «Статистическая физика и молекулярное моделирование»: $\langle 0,4 \times \text{Среднее за коллоквиумы} + 0,2 \times \text{Среднее за тесты} + 0,4 \times \text{Экзамен} \rangle$.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)

Примерные вопросы к коллоквиуму

1. Какой ансамбль используется при моделировании системы с постоянной температурой?
2. В чём физический смысл статистической суммы в каноническом ансамбле?
3. Как термостат поддерживает постоянную температуру в молекулярной динамике?
4. Чем отличается микроканонический ансамбль от канонического?
5. Как выводится распределение Гиббса из принципов статистической физики?
6. Какой метод используется для учёта дальнедействующих электростатических взаимодействий в молекулярной динамике?
7. Что такое баростат и зачем он нужен в симуляциях?
8. Как соотношение Эйнштейна связывает диффузию и подвижность частиц?
9. Как уравнения Гамильтона описывают эволюцию динамической системы?
10. Как модель Борна описывает энергию сольватации ионов в растворе?

Примерные задания для теста

Вопрос 1.

Какой статистический ансамбль используется при моделировании системы с постоянной температурой, объёмом и числом частиц?

1. Микроканонический ансамбль (NVE)
2. Изобарно-изотермический ансамбль (NPT)
3. Канонический ансамбль (NVT)
4. Большой канонический ансамбль (μVT)

Правильный ответ: 3

Вопрос 2.

Какой метод применяется для эффективного учёта дальнедействующих электростатических взаимодействий в молекулярной динамике?

1. Метод ближних соседей
2. Метод прямого суммирования
3. Метод частиц-мешков (PPPM)
4. Метод градиентного спуска

Правильный ответ: 3

Вопрос 3.

Что описывает первый закон Фика?

1. Зависимость давления от объёма
2. Поток вещества при диффузии пропорционален градиенту концентрации
3. Связь между температурой и средней кинетической энергией
4. Изменение энтропии в изолированной системе

Правильный ответ: 2

Вопрос 4.

Какой термостат обеспечивает строгое соответствие каноническому ансамблю за счёт введения дополнительной динамической переменной?

1. Термостат Берендсена

2. Термостат Ланжевена
3. Термостат Носе–Хувера
4. Термостат Андреасена

Правильный ответ: 3

Вопрос 5.

Какое уравнение связывает коэффициент диффузии и подвижность частицы?

1. Уравнение состояния идеального газа
2. Уравнение Нернста–Эйнштейна
3. Уравнение Больцмана
4. Уравнение Гамильтона

Правильный ответ: 2

Задания для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

№ п/п	Задание	Ответ	Компетенция
1.	Какой ансамбль соответствует системе с постоянной температурой?	Канонический	УК-1
2.	Как называется функция, через которую выражаются все термодинамические величины в каноническом ансамбле?	Статистическая сумма	УК-2
3.	Какой закон описывает движение частиц под действием сил?	Второй закон Ньютона	ПК-1
4.	Что определяет гамильтониан системы?	Полная энергия (кинетическая + потенциальная)	ПК-2
5.	Какой ансамбль используется при постоянных N , V , E ?	Микроканонический	ПК-3
6.	Какой метод термостатирования изменяет скорости частиц для поддержания T ?	Термостат Берендсена	ПК-5
7.	Какой термостат соответствует строгому каноническому ансамблю?	Термостат Носе–Хувера	ПК-3
8.	Что описывает распределение Больцмана?	Вероятность состояния с заданной энергией	УК-1
9.	Какой закон описывает диффузию под действием градиента концентрации?	Первый закон Фика	ПК-1
10.	Как называется соотношение между D и μ ?	Соотношение Эйнштейна	ПК-2
11.	Какой ансамбль используется при постоянных N , P , T ?	Изобарно- изотермический	ПК-5
12.	Что такое баростат?	Устройство для поддержания	УК-2

		постоянного давления	
13.	Какой метод используется для расчёта энергии сольватации иона?	Модель Борна	ПК-3
14.	Какой закон связывает тепловой поток и градиент температуры?	Закон Фурье	УК-1
15.	Какой метод интегрирования часто используется в молекулярной динамике?	Алгоритм Верле	ПК-2
16.	Что такое NVE-ансамбль?	Микроканонический ансамбль	ПК-1
17.	Какой термодинамический потенциал связан со статсуммой?	Свободная энергия Гельмгольца	ПК-3
18.	Какой закон описывает поток тепла в конденсированных средах?	Второй закон Фика (для температуры — аналог)	ПК-5
19.	Что описывает второй закон Фика?	Изменение концентрации во времени (диффузионное уравнение)	УК-2
20.	Какой принцип лежит в основе вывода распределения Гиббса?	Максимизация энтропии при фиксированной средней энергии	ПК-1