

РЕЦЕНЗІЯ

на навчальний посібник «*Чисельні методи. Молекулярно-динамічні розрахунки в LAMMPS.*

Моделювання полімеру в водному середовищі»

Автор: Бур'ян Сергій Анатолійович

Рукопис навчального посібника Сергія Анатолійовича Бур'яна є актуальним і значущим ресурсом для студентів 3 курсу бакалаврату кафедри молекулярної фізики фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія», що навчаються за освітньо-професійною програмою «Фізика». Матеріал посібника відповідає робочій програмі «Навчальної практики за фахом», зосереджуючись на набутті студентами практичних навичок в проведенні комп'ютерного експерименту, роботі з програмними пакетами, аналізі чисельних розрахунків і загалом трансформації теоретичних знань у практичні вміння, необхідні для наукових досліджень.

Посібник демонструє високий науково-методичний рівень викладу, що забезпечує студентам фундаментальне розуміння чисельних методів молекулярної динаміки, використовуючи програмне забезпечення LAMMPS, яке є ключовим для сучасних досліджень у сферах, що швидко розвиваються, як то фундаментальна та медична фізика. Зміст рукопису покриває не тільки теоретичні основи, але й забезпечує інструкції та приклади, які відповідають практичним вимогам дисципліни та сприяють глибокому засвоєнню інформації.

Автор з успіхом інтегрує обговорення конкретних програмних пакетів з наявними науковими задачами і методами обробки даних, які відображають зміст практичної навчальної дисципліни, визначені вимогами Стандарту вищої освіти України. Це робить посібник не тільки важливим для здобуття теоретичних знань, але й надзвичайно корисним для виконання практичних завдань і підготовки до проведення наукових досліджень.

З урахуванням вищезазначеного, рукопис «Чисельні методи. Молекулярно-динамічні розрахунки в LAMMPS. Моделювання полімеру в водному середовищі» є надійним та своєчасним джерелом знань та практичних навичок для студентів, які готуються до навчальної практики та наукової роботи в галузі фізики.

Вважаю, що рецензований навчальний посібник «Чисельні методи. Молекулярно-динамічні розрахунки в LAMMPS. Моделювання полімеру в водному середовищі» може бути рекомендований до друку.

Науковий співробітник

Національного центру

наукових досліджень Франції,

к.ф.-м.н.,



М.В. Ісаєв