

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 27.04.2023 16:31:13

Уникальный программный ключ:

d7a26b9e8ca85e98ac3de2ab454b4659d961f749

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Компьютерные методы в физике

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

03.03.02 ФИЗИКА

Профиль

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

Формы контроля в семестрах:  
зачет с оценкой 7

в том числе:

аудиторные занятия 51

самостоятельная работа 57

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	18			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	57	57	57	57
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

*д.ф.-м.н., проф., Капуткина Н.Е.*

Рабочая программа

**Компьютерные методы в физике**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 03.03.02 ФИЗИКА (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

03.03.02 ФИЗИКА, 03.03.02-БФ3-22.plx , утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

03.03.02 ФИЗИКА, , утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра физической химии**

Протокол от 22.06.2021 г., №11-20/21

Руководитель подразделения Салимон Алексей Игоревич

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Научить компьютерным методам решения реальных задач физики и физи-ческой химии, принципам алгоритмизации задач, написанию программ для ЭВМ и их реализации
-----	--

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.11
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Квантовая механика	
2.1.2	Методы исследования материалов	
2.1.3	Фазовые равновесия и структурообразование	
2.1.4	Физика поверхности	
2.1.5	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы	
2.1.6	Методы контроля и анализа веществ	
2.1.7	Теория поверхностных явлений	
2.1.8	Техника физико-химического эксперимента	
2.1.9	Электродинамика	
2.1.10	Кристаллография	
2.1.11	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.12	Методы математической физики	
2.1.13	Теоретическая механика и основы теории упругости.	
2.1.14	Физика	
2.1.15	Электротехника	
2.1.16	Математика	
2.1.17	Органическая химия	
2.1.18	Информатика	
2.1.19	Химия	
2.1.20	Инженерная и компьютерная графика	
2.1.21	Высшая математика. Спецглавы.	
2.1.22	Линейная алгебра	
2.1.23	Теория функций комплексных переменных	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Методы вычислительной физики	
2.2.2	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.3	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.4	Статистические расчеты равновесий	
2.2.5	Термодинамика неравновесных процессов	
2.2.6	Термодинамика сложных систем	
2.2.7	Квантовые вычисления	
2.2.8	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.9	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.10	Теоретическая нанофотоника	
2.2.11	Физика низкоразмерных систем	
2.2.12	Фотоника	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

**ОПК-1:** Способен применять базовые знания в области физико-математических и (или) естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности, осуществлять моделирование и анализ для проведения детальных исследований и поиска решения технических вопросов в соответствующей области исследования

**Знать:**

ОПК-1-31 численные методы при решении прикладных задач по своему профилю подготовки

<b>ПК-2: Способен осуществлять выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок в области физики</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-2-У1 выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок в области физики
<b>ОПК-1: Способен применять базовые знания в области физико-математических и (или) естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности, осуществлять моделирование и анализ для проведения детальных исследований и поиска решения технических вопросов в соответствующей области исследования</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У1 применять численные методы при решении прикладных задач по своему профилю подготовки
<b>ПК-2: Способен осуществлять выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок в области физики</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-2-В1 навыком выполнения экспериментов и оформления результатов исследований и разработок в области физики
<b>ОПК-1: Способен применять базовые знания в области физико-математических и (или) естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности, осуществлять моделирование и анализ для проведения детальных исследований и поиска решения технических вопросов в соответствующей области исследования</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В1 навыками применения численных методов при решении прикладных задач по своему профилю подготовки

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	<b>Раздел 1. Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло</b>							
1.1	Применения компьютерных методов в физике и физической химии. Основные задачи, требующие применения компьютерных методов. Динамические, вариационные, стохастические методы решения задач. /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.2	Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло /Пр/	7	6	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.3	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.4	Численные методы интегрирования. Аппроксимация функций. Вычисление одно- и многомерных интегралов методами Симпсона и Монте-Карло. Аппроксимация данных эксперимента методом наименьших квадратов. Разложение по набору базисных функций. Ошибка эксперимента и ошибка аппроксимации. Структура программы для ЭВМ. /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

1.5	Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов /Пр/	7	6	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2		КМ1	Р1
1.6	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.7	Интегрирование дифференциальных уравнений. Метод конечных разностей. Запись производных. Метод Эйлера. Другие алгоритмы. Уравнения механики. Алгоритм Верле. Рассеяние частицы в центральном поле. /Лек/	7	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.8	Задача о странствующем коммивояжере /Пр/	7	6	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
1.9	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
	<b>Раздел 2. Построение двухкомпонентной фазовой диаграммы по известным энергиям Гиббса конкурирующих фаз</b>							
2.1	Компьютерное построение двухкомпонентных фазовых диаграмм. Построение двухкомпонентной фазовой диаграммы по известным энергиям Гиббса конкурирующих фаз. Прямая и обратная задачи. Основные алгоритмы расчета. Организация вычислений на ЭВМ. /Лек/	7	3	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.2	Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору) /Пр/	7	6	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.3	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	7	10	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.4	Химическое равновесие в многокомпонентных системах. Моделирование химического равновесия в многокомпонентной системе. Принцип минимума энергии Гиббса. Выбор химических уравнений. Итерационная процедура расчета. Регулировка шага реакции. Структура программы для ЭВМ. /Лек/	7	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

2.5	Проработка лекционного материала. Подготовка к практическим занятиям /Ср/	7	7	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.6	Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору) /Пр/	7	6	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2		КМ1	Р1
2.7	Кинетика реакций в многокомпонентных системах. Кинетические уравнения химических реакций в многокомпонентных системах. Монотонные и периодические решения. Обратная связь. Задача Лотка. Брюсселятор. «Химические часы». Структура программы для ЭВМ. /Лек/	7	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.8	Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору) /Пр/	7	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			
2.9	Подготовка к зачету с оценкой /Ср/	7	10	ОПК-1-З1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1 Э2			

### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

#### 5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Расчетно-графическое задание	ОПК-1-З1;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-2-У1;ПК-2-В1	Вычисление интегралов методами Симпсона и Монте-Карло Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов Задача о странствующем коммивояжере Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору) Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору) Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору)

#### 5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)

Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
Р1	Расчетно-графическое задание	ОПК-1-З1;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-2-У1;ПК-2-В1	Выполнение расчетного задания с использованием компьютерных программ

**5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)**

Дать описание основных приемов используемых при:

Аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов

Задача о странствующем коммивояжере

Построение фазовой диаграммы двойной системы по заданным энергиям Гиббса конкурирующих фаз (по выбору)

Расчет химического равновесия в многокомпонентной системе (по выбору)

Расчет кинетики многокомпонентной системы с несколькими одновременно протекающими реакциями при наличии автокаталитического этапа (по выбору)

**5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)**

Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно действует по применению полученных знаний на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильно действует по применению знаний на практике, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляемыми после дополнительных и наводящих вопросов, правильно действует по применению знаний на практике;

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «неявка» – обучающийся на экзамен не явился.

**6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ****6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Белашенко Д. К.	Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2005
Л1.2	Белашенко Д. К.	Компьютерные методы в физике и физической химии: лаб. практикум	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2012

**6.1.2. Дополнительная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Аронин А. С., Гончаров В. А., Суворов Э. В., др., Суворов Э. В.	Физико-химия и технология аморфных и микрокристаллических сплавов: Лаб. практикум для студ. спец. 11.05	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 1988

**6.1.3. Методические разработки**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Диков А. В., Степанова С. В., Сугробов Г. В.	Математическое моделирование и численные методы: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ПГПУ), 2000

**6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

Э1	Федеральный портал «Российское образование» <a href="http://edu.ru">http://edu.ru</a> ;			
Э2	Российская государственная библиотека <a href="http://www.rsl.ru">http://www.rsl.ru</a> ;			

**6.3 Перечень программного обеспечения**

П.1	Физическая химия			
П.2	Microsoft Office			
П.3	LMS Canvas			
П.4	MATCAD			

**6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных**

И.1	Научная электронная библиотека eLIBRARY <a href="https://elibrary.ru/">https://elibrary.ru/</a>			
-----	---	--	--	--

<b>7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ</b>		
<b>Ауд.</b>	<b>Назначение</b>	<b>Оснащение</b>
А-323	Компьютерный класс	комплект учебной мебели пакет на 12 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office
Читальный зал №4 (Б)		комплект учебной мебели на 20 рабочих мест, компьютеры с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus

### **8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

Лекционные занятия проводятся с использованием мультимедийных средств. Практические занятия проводятся с использованием компьютерных программ математического и имитационного моделирования. Для обработки экспериментальных данных и их визуализации используются электронные таблицы MS Excel.