

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 21.09.2023 17:07:29

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования**

**«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»**

## Рабочая программа дисциплины (модуля)

# Методы вычислительной физики

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

28.03.03 НАНОМАТЕРИАЛЫ

Профиль

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**очная**

Общая трудоемкость

**3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 8

аудиторные занятия

36

самостоятельная работа

72

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
	Неделя 12			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	24	24	24	24
Практические	12	12	12	12
Итого ауд.	36	36	36	36
Контактная работа	36	36	36	36
Сам. работа	72	72	72	72
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

*дфмн, Профессор, Капуткина Наталия Ефимовна*

Рабочая программа

**Методы вычислительной физики**

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 28.03.03 НАНОМАТЕРИАЛЫ (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

Направление подготовки: 28.03.03 Наноматериалы, 28.03.03-БНМ-23.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

Направление подготовки: 28.03.03 Наноматериалы, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра физической химии**

Протокол от 21.06.2022 г., №11-21/22

Руководитель подразделения Салимон Алексей Игоревич

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Цель - ознакомиться с методами математического моделирования и статистического анализа данных, принципам алгоритмизации задач.
1.2	
1.3	Задачи
1.4	Научить
1.5	1 прогнозировать и анализировать влияние формы потенциала межчастичного взаимодействия на поведение частиц – атомов и молекул, траектории их движения в поле сил;
1.6	2. программировать задачи стохастического характера с применением метода Монте-Карло;
1.7	3. анализировать информацию о структуре компьютерных моделей в системах с периодическими граничными условиями и в кластерах конечного размера, а также информацию о термодинамических свойствах;
1.8	4. моделировать кинетику сложных систем химических реакций, в том числе с осциллирующими решениями;
1.9	5. обосновывать выбор адекватных моделей.

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.08
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Нанотехнологии	
2.1.2	Процессы получения и обработки материалов	
2.1.3	Размерные эффекты в наноструктурных материалах	
2.1.4	Строение некристаллических систем	
2.1.5	Термодинамика металлических растворов	
2.1.6	Физика поверхности	
2.1.7	Физико-химия наносистем	
2.1.8	Химические способы получения наноматериалов	
2.1.9	Метрология, стандартизация и технические измерения в композиционных материалах	
2.1.10	Метрология, стандартизация и технические измерения функциональных наносистем	
2.1.11	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.12	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.13	Физика конденсированного состояния	
2.1.14	Элективные курсы по физической культуре и спорту	
2.1.15	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы	
2.1.16	Процессы получения наночастиц и наноматериалов	
2.1.17	Основы квантовой механики	
2.1.18	Теоретическая механика и основы теории упругости	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	

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

<b>ПК-1: Способен участвовать в проведении экспериментов по измерению характеристик наноматериалов и их расчетов</b>
<b>Знать:</b>
ПК-1-31 методы математического анализа и численные методы для решения прикладных задач по своему профилю подготовки
<b>ПК-2: Способен осуществлять сбор, систематизацию и анализ научно-технической информации о существующих наноматериалах</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-2-У1 моделировать перколяционные системы, аморфные фазы, жидкости
<b>ПК-1: Способен участвовать в проведении экспериментов по измерению характеристик наноматериалов и их расчетов</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 использовать методы математического анализа и численные методы 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. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент</b>							
1.1	Математические модели в физике, химии, биологии. Жесткие и мягкие модели. Источники ошибок в компьютерных моделях /Лек/	8	4	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
1.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
1.3	Контроль устойчивости решения в физических моделях /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
	<b>Раздел 2. Моделирование непрерывных процессов и полей и дискретные модели</b>							
2.1	Интегрирование уравнений движения. Разностные методы численных решений уравнений математической физики. /Лек/	8	4	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
2.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
2.3	Моделирование движения частицы в центральном силовом поле /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
	<b>Раздел 3. Стохастические методы моделирования</b>							
3.1	Стохастические методы. Задача о странствующем коммивояжере. Классический метод Монте-Карло. Основные алгоритмы расчета /Лек/	8	4	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
3.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			
3.3	Классический метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Э1			

3.4	Системы со случайной структурой. Просачивание и проводимость. Перколяционные задачи. Моделирование перколяционной системы /Лек/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.5	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.6	Модель Изинга. Перколяционные системы /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
<b>Раздел 4. Моделирование атомных систем</b>								
4.1	Методы молекулярной динамики и статической релаксации. Межчастичные потенциалы. Периодические граничные условия и кластеры. /Лек/	8	4	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.3	Межчастичные потенциалы взаимодействия Метод непрерывной статической релаксации /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.4	Расчеты свойств атомных систем методами молекулярной динамики и статической релаксации. Жидкие и аморфные вещества. Структура, термодинамические свойства, диффузия, колебания атомов. /Лек/	8	6	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.5	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1		КМ1	Р1
4.6	Построение атомной модели аморфной фазы с заданным межчастичным потенциалом методом непрерывной статической релаксации. Построение атомной модели жидкости с заданным парным потенциалом межчастичного взаимодействия методом молекулярной динамики /Пр/	8	2	ПК-1-31 ПК-1-У1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

<b>5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки</b>			
Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
КМ1	Домашнее расчетно-графическое задание	ПК-1-31;ПК-1-У1;ПК-2-У1	<p>Рассчитать траектории классической частицы, влетающей в центральное силовое поле под различными прицельными расстояниями, и найти зависимость угла отклонения от прицельного расстояния и скорости частицы.</p> <p>Источник поля находится в начале координат. Частица движется слева направо и ее начальная скорость параллельна оси <math>x</math>.</p> <p>Траектория движения частицы рассчитывается по алгоритму Л.Верле, в котором используются значения координат частицы на данном шаге по времени и на предыдущем шаге.</p> <p>Следует провести расчеты при определенном значении прицельного расстояния и не менее трех значениях начальной скорости частицы, чтобы выяснить, как меняется траектория частицы в зависимости от начальной скорости, затем следует построить графики зависимости угла отклонения частицы от прицельного расстояния при разных значениях начальной скорости. В отчете должны быть приведены исходные данные, графики результатов работы, обсуждение результатов и выводы.</p>
<b>5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)</b>			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Домашнее расчетно-графическое задание	ПК-1-31;ПК-1-У1;ПК-2-У1	Расчетно-графическое задание
<b>5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)</b>			
Экзамен не предусмотрен			
<b>5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)</b>			
<p>Шкала оценивания знаний обучающихся на контрольных работах</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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;</p> <p>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.</p> <p>Оценка «неявка» – обучающийся на экзамен не явился.</p>			

## 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
--	---------------------	----------	------------	-------------------

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Диков А. В.	Компьютерные технологии: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ПГПУ), 2005

### 6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Капуткина Н. Е., Бокштейн Б. С.	Физическая химия: Разд.: Химическое равновесие: Метод. указания для самостоят. работы студ. всех спец.	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 2001

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

Э1	Каталог Российской государственной библиотеки (РГБ) [Электронный ресурс].	– <a href="http://www.aleph.rsl.ru">http://www.aleph.rsl.ru</a> (Ссылки на внешний сайт.) Ссылки на внешний сайт..		
----	---	---	--	--

### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Лицензии ПО Windows Server CAL ALNG LicSAPk MVL DvcCAL, ПО WinEDUA3 ALNG SubsVL MVL PerUsr и PerUsr			
П.2	ESET NOD32 Antivirus			
П.3	Win Pro 10 32-bit/64-bit			

### 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>			
-----	---	--	--	--

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
А-323а	Аудитория для самостоятельной работы	комплект учебной мебели пакет на 6 рабочих мест с компьютерами, принтер, лицензионных программ MS Office
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, ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с 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

Освоение каждого раздела курса необходимо начинать с изучения лекционного материала: конспекта лекции, рекомендуемой литературы. Критерием успешного освоения лекционно-го материала для каждого студента могут служить результаты самоконтроля. Если студент оказывается способным справиться с большинством предлагаемых в каждом разделе дисциплины контрольных вопросов, тестов и задач, значит, процесс освоения материала идет успешно. В противном случае необходимо обратиться к лектору на консультации или на факультативном теоретическом семинаре. Необходимо обращать особое внимание на выбор адекватных моделей, доказательство адекватности и оценку устойчивости используемых моделей.