

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 27.04.2023 16:31:17

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)

Методы вычислительной физики

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

03.03.02 ФИЗИКА

Профиль

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 144

Формы контроля в семестрах:
экзамен 8

в том числе:

аудиторные занятия 48

самостоятельная работа 41

часов на контроль 55

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
	12			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Лекции	24	24	24	24
Практические	24	24	24	24
Итого ауд.	48	48	48	48
Контактная работа	48	48	48	48
Сам. работа	41	41	41	41
Часы на контроль	55	55	55	55
Итого	144	144	144	144

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 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	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.13
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Методы физико-химических исследований	
2.1.2	Оформление результатов научной деятельности	
2.1.3	Статистическая физика	
2.1.4	Строение некристаллических систем	
2.1.5	Теория химической связи	
2.1.6	Термодинамика металлических растворов	
2.1.7	Физика конденсированного состояния	
2.1.8	Физические свойства твердых тел	
2.1.9	Квантовая механика	
2.1.10	Методы исследования материалов	
2.1.11	Методы обработки статистических данных (анализ данных)	
2.1.12	Метрология, стандартизация и технические измерения	
2.1.13	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.14	Фазовые равновесия и структурообразование	
2.1.15	Физика поверхности	
2.1.16	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы	
2.1.17	Методы контроля и анализа веществ	
2.1.18	Теория поверхностных явлений	
2.1.19	Техника физико-химического эксперимента	
2.1.20	Электродинамика	
2.1.21	Кристаллография	
2.1.22	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.23	Методы математической физики	
2.1.24	Теоретическая механика и основы теории упругости.	
2.1.25	Физика	
2.1.26	Физическая химия	
2.1.27	Электротехника	
2.1.28	Математика	
2.1.29	Органическая химия	
2.1.30	Информатика	
2.1.31	Химия	
2.1.32	Инженерная и компьютерная графика	
2.1.33	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.34	Введение в физику полупроводников	
2.1.35	Введение в физику твердого тела	
2.1.36	Квантовая механика. Спецглавы.	

2.1.37	Компьютерные методы в физике
2.1.38	Нелинейная физика
2.1.39	Специальный физический практикум
2.1.40	Анализ данных
2.1.41	Высшая математика. Спецглавы.
2.1.42	Машинное обучение
2.1.43	Линейная алгебра
2.1.44	Теория функций комплексных переменных
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-2: Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные, демонстрировать навыки работы в лаборатории / мастерской, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, интерпретировать данные и делать выводы в соответствующей области исследования	
Знать:	
ОПК-2-31 влияние формы потенциала межчастичного взаимодействия на поведение частиц – атомов и молекул, траектории их движения в поле сил	
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 выбор межчастичных потенциалов для моделирования систем с заданным типом химической связи – простых жидких и аморфных веществ, металлов, ионных систем и т.д	
ПК-2: Способен осуществлять выполнение экспериментов и оформление результатов исследований и разработок в области физики	
Уметь:	
ПК-2-У1 выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок в области физики	
ОПК-2: Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные, демонстрировать навыки работы в лаборатории / мастерской, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, интерпретировать данные и делать выводы в соответствующей области исследования	
Уметь:	
ОПК-2-У2 рассчитывать зависимости параметров упорядочения (например, намагниченности) от температуры методом Монте-Карло	
ОПК-2-У1 анализировать информацию о структуре компьютерных моделей в системах с периодическими граничными условиями и в кластерах конечного размера, а также информацию о термодинамических свойствах моделей	
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	
Уметь:	
ОПК-1-У1 моделировать кластеры различной формы	
Владеть:	
ОПК-1-В1 способами решения теоретических и практических типовых и системных задач, связанных с профессиональной деятельностью	
ОПК-2: Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные, демонстрировать навыки работы в лаборатории / мастерской, способность разрабатывать и проводить экспериментальные исследования, интерпретировать данные и делать выводы в соответствующей области исследования	
Владеть:	
ОПК-2-В1 методами математического моделирования для определения свойств макроскопических систем	

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
	Раздел 1. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент							
1.1	Математические модели в физике, химии, биологии. Жесткие и мягкие модели. Источники ошибок в компьютерных моделях /Лек/	8	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-У2 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	2	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
1.3	Контроль устойчивости решения в физических моделях /Пр/	8	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
	Раздел 2. Моделирование непрерывных процессов и полей и дискретные модели							
2.1	Интегрирование уравнений движения. Разностные методы численных решений уравнений математической физики. /Лек/	8	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	2	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
2.3	Моделирование движения частицы в центральном силовом поле /Пр/	8	4	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
	Раздел 3. Стохастические методы моделирования							
3.1	Стохастические методы. Задача о странствующем коммивояжере. Классический метод Монте-Карло. Основные алгоритмы расчета /Лек/	8	4	ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	2	ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.3	Классический метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса /Пр/	8	4	ОПК-1-В1 ОПК-2-У2 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

3.4	Системы со случайной структурой. Просачивание и проводимость. Перколяционные задачи. Моделирование перколяционной системы /Лек/	8	4	ОПК-1-В1 ОПК-2-У2 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.5	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	11	ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
3.6	Модель Изинга. Перколяционные системы /Пр/	8	4	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
Раздел 4. Моделирование атомных систем								
4.1	Методы молекулярной динамики и статической релаксации. Межчастичные потенциалы. Периодические граничные условия и кластеры. /Лек/	8	4	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.2	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1 ПК-2-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.3	Межчастичные потенциалы взаимодействия Метод непрерывной статической релаксации /Пр/	8	4	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-У1 ОПК-2-В1	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	4	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			
4.5	Выполнение индивидуальных заданий /Ср/	8	12	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-В1 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	4	ОПК-1-31 ОПК-1-В1 ОПК-2-31 ОПК-2-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Э1			

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	Домашнее расчетно-графическое задание	ОПК-2-31;ОПК-2-У1;ОПК-2-У2;ОПК-2-В1;ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;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 x.</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>
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	Домашнее расчетно-графическое задание	ОПК-2-31;ОПК-2-У1;ОПК-2-У2;ОПК-2-В1;ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-2-У1	<p>Расчетно-графическое задание</p> <p>1. 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 x.</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.</p>
5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)			
<p>Рассчитать магнитные свойства кристалла с данной структурой методом Монте-Карло в модели Изинга при учете взаимодействия ближайших соседей.</p> <p>Найти зависимость спонтанной намагниченности и магнитной восприимчивости от температуры.</p> <p>Определить температуру ферромагнитного или антиферромагнитного перехода.</p>			
5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)			
<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
Л2.1	Диков А. В.	Компьютерные технологии: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ППУ), 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].	– http://www.aleph.rsl.ru (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 https://elibrary.ru/
-----	---

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
А-323	Компьютерный класс	комплект учебной мебели пакет на 12 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 лекционного 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