

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1153281	Основы численного эксперимента

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Прикладные математика и физика	Код ОП 1. 03.03.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.03.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Основы численного эксперимента

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает курс Вычислительная физика и проект по модулю. Курс вычислительной физики посвящен изучению методических основ применения численных методов к решению широкого класса физических проблем, начиная с простой классической задачи движения одного тела и заканчивая квантовыми многочастичными моделями. Поскольку активное участие в численном моделировании вырабатывает более глубокое интуитивное понимание физических концепций, то основной целью курса является обучение студентов тому, как можно сформулировать и решить поставленную задачу на компьютере. В ходе практических занятий студенты проводят научные исследования при помощи компьютерного моделирования, что позволяет глубже понять используемые методы и процесс сведения физической проблемы к математической модели.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Проект по модулю Основы численного эксперимента	3
2	Вычислительная физика	3
ИТОГО по модулю:		6

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Вычислительная физика	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты	З-1 - Сравнить возможности различных современных программных средств для

	и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	<p>сбора, передачи, обработки и накопления информации</p> <p>У-1 - Осуществлять выбор адекватного программного обеспечения при решении задач по профилю деятельности</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения задач по профилю деятельности, используя адекватное программное обеспечение</p>
	ОПК-6 - Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной формах в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	<p>З-2 - Демонстрировать понимание правил оформления научных и научно-технических отчетов и других форм представления результатов профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Выбирать стиль оформления научных и научно-технических отчетов, тезисов докладов на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p> <p>П-2 - Иметь опыт написания и оформления отчетов, тезисов, подготовки презентаций по результатам собственной научно-исследовательской / научно-технической работы на русском и английском языках в соответствии со сформированной информационной и библиографической культурой</p> <p>Д-1 - Проявлять коммуникабельность и корректность в общении</p>
	ПК-3 - Способен критически оценивать применимость используемых алгоритмов и методов при исследовании физико-химических свойств новых функциональных материалах	<p>З-3 - Описать способы оценки научно-технического уровня достигнутых результатов</p> <p>У-3 - Пользоваться современными методами графического представления расчетной информации</p> <p>П-1 - Разрабатывать рекомендации по сертификации технических средств (оборудования, алгоритмов, программных продуктов)</p>
	ПК-4 - Способен понимать принципы составления проектов работ в области физики конденсированного	З-2 - Перечислить требования системы экологического менеджмента и системы менеджмента производственной безопасности и здоровья

	состояния и материаловедения	<p>У-1 - Определять оптимальные методы и средства проведения исследований и разработок</p> <p>П-1 - Выполнять разработку компьютерных программ для научно-исследовательских и прикладных целей</p>
Проект по модулю Основы численного эксперимента	ОПК-6 - Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной формах в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	<p>З-2 - Демонстрировать понимание правил оформления научных и научно-технических отчетов и других форм представления результатов профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Выбирать стиль оформления научных и научно-технических отчетов, тезисов докладов на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p> <p>П-2 - Иметь опыт написания и оформления отчетов, тезисов, подготовки презентаций по результатам собственной научно-исследовательской / научно-технической работы на русском и английском языках в соответствии со сформированной информационной и библиографической культурой</p> <p>Д-1 - Проявлять коммуникабельность и корректность в общении</p>
	ПК-3 - Способен критически оценивать применимость используемых алгоритмов и методов при исследовании физико-химических свойств новых функциональных материалах	У-4 - Производить оценку погрешностей экспериментальных данных
	ПК-4 - Способен понимать принципы составления проектов работ в области физики конденсированного состояния и материаловедения	<p>З-2 - Перечислить требования системы экологического менеджмента и системы менеджмента производственной безопасности и здоровья</p> <p>У-1 - Определять оптимальные методы и средства проведения исследований и разработок</p>

		П-1 - Выполнять разработку компьютерных программ для научно-исследовательских и прикладных целей
--	--	--

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Вычислительная физика

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико-математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Владимирович, Заведующий кафедрой, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Решение классической задачи нескольких тел	Решение простых дифференциальных уравнений. Методы высших порядков. Методы Рунге-Кутты. Интегрирование классических уравнений движения. Метод Эйлера-Рундсона. Проблемы граничных значений. Численное нахождение корней уравнения и минимизация. Метод Ньютона. Метод сопряженного градиента. Применение изученных методов. Задача движения одного тела. Сила трения. Релятивистские уравнения движения. Задача Кеплера. Задача трех тел. Больше чем три тела.
P2	Дифференциальные уравнения в частных производных	Метод конечных разностей. Метод сеток. Уравнения Пуассона и Лапласа. Метод релаксации. Метод верхней релаксации Гаусса-Сайдела. Мультисеточные методы. Решение дифференциальных уравнений в частных производных методом линий. Уравнение диффузии. Стабильность расчетной схемы. Метод Кранка-Николсона. Волновое уравнение. Колебания струны. Реалистичные модели. Метод конечных элементов. Обобщение на произвольные граничные условия. Обобщение на случай многомерных задач. Нелинейные уравнения в частных производных. Уравнения Максвелла. Алгоритм Вишена. Гидродинамика и уравнение Навье-Стокса. Солитоны и уравнение Кортевега-де Фриса.
P3	Методы интегрирования	Стандартные методы интегрирования. Численное интегрирование многомерных интегралов. Вычисление интегралов простейшим методом Монте-Карло. Генераторы случайных

		чисел. Вычисление многомерных интегралов методом Монте-Карло. Реализация метода Монте-Карло на параллельных архитектурах. Анализ погрешности метода Монте-Карло. Неравномерное распределение вероятностей. Выборка по значимости. Методы случайного блуждания.
P4	Перколяция	Ячеистая перколяция на квадратной решетке. Величины, характеризующие перколяцию. Одномерный случай. Случай бесконечной размерности. Маркировка кластеров. Критические показатели и конечномерное масштабирование. Ренорм-группа. Метод Монте-Карло для ре-норм-группы. Метод разложения в ряд. Фракталы. Регулярные фракталы и самоподобие. Процессы роста фракталов. Модель Эдена. Оккупирующая перколяция. Диффузия в неупорядоченных средах. Агрегация с ограничением диффузии.
P5	Магнитные системы	Модель Изинга. Точное решение модели Изинга для решетки 2x2. Восприимчивость. Удельная теплоемкость. Алгоритм Метрополиса. Систематические ошибки: граничные эффекты. Термодинамические свойства системы вблизи точки возникновения магнитного порядка. Теория молекулярного поля. Модель Гейзенберга. Свойства при нулевой температуре и основное состояние Гейзенбергского ферромагнетика. Свойства при нулевой температуре и основное состояние Гейзенбергского ферромагнетика. Поведение Гейзенбергского ферромагнетика при низких температурах. Спиновые волны. Высокотемпературная восприимчивость. Модель Хаббарда. Переход к модели Гейзенберга. Проект ALPS (Алгоритмы и Библиотеки для Физического Моделирования).
P6	Решение квантовой задачи	Обзор квантовой теории. Стационарное уравнение Шредингера. Нестационарное уравнение Шредингера. Анализ квантовых систем с помощью метода случайных блужданий. Вариационные методы Монте-Карло для квантовомеханических систем. Решение задачи на собственные значения и собственные функции с использованием параллельных алгоритмов.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология самостоятельной работы	ПК-3 - Способен критически оценивать применимость используемых алгоритмов и методов при	З-3 - Описать способы оценки научно-технического уровня достигнутых результатов

	профориентационная деятельность		исследованиях физико-химических свойств новых функциональных материалах	
--	---------------------------------	--	---	--

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительная физика

Электронные ресурсы (издания)

1. Формалев, В. Ф.; Численные методы : учебник.; Физматлит, Москва; 2006; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=69333> (Электронное издание)
2. Диков, А. В., Сугробов, Г. В.; Математическое моделирование и численные методы : учебное пособие.; ПГПУ, Пенза; 2000; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=96973> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Ращиков, В. И., Рошаль, А. С.; Численные методы решения физических задач : учеб. пособие.; Лань, СПб. ; Москва ; Краснодар; 2005 (16 экз.)
2. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
3. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
4. Кунин, С. Е., Стивен Е., Баркалов, А. Д., Явохин, А. Н., Матвеев, А. Н.; Вычислительная физика; Мир, Москва; 1992 (3 экз.)
5. Кунин, С. Е., Стивен Е.; Вычислительная физика : Пер. с англ.; Мир, Москва; 1992 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека. Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>
2. Список библиотек, доступных в Интернет и входящих в проект «Либнет». Режим до-ступа: <http://www.valley.ru/-nicr/listrum.htm>
3. Российская национальная библиотека. Режим доступа: <http://www.rsl.ru>
4. В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко, Наночастицы, наноматериалы, нанотехнологии (учебное пособие), Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. 84 с. ISBN 978-5-321-01654-1.
5. В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко, Моделирование физических свойств наноматериалов на базе параллельных алгоритмов (учебное пособие), Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. 86 с. ISBN 978-5-321-01653-4
6. В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко, Компьютерное моделирование атомной структуры и свойств материалов (учебное пособие), Екатеринбург: УрФУ, 2010. 116 с. ISBN 978-5-321-01836-1

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Информационные материалы по MPI (www.mpi-forum.org)

Информационно-аналитические материалы по параллельным вычислениям (www.parallel.ru)

Introduction to Parallel Computing (Teaching Course) (<http://www.ece.nwu.edu/~choudhar/C58/>)

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительная физика

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	VASP 5.2 Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES