

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Х.И. Амирханова
ДАГЕСТАНСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА РАН

УТВЕРЖДАЮ



И.о. директора

[Handwritten signature]

А.К. Мургазаев

« 30 » июня 2015 г.

Одобрена Ученым советом ФГБУН ИФ ДНЦ РАН

Протокол № 6 от « 30 » июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
дисциплины Б1.В.ДВ.2.
МЕТОДЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ

Уровень образования

Подготовка кадров высшей квалификации (аспирантура)

Направление подготовки

03.06.01 Физика и астрономия

Квалификация (степень) выпускника:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Трудоемкость в академических часах	72 часов, в т.ч. Лекции – 12 ч., Лабораторные занятия – 6 ч., Самостоятельная работа – 54 ч., Зачет
Трудоемкость в зачетных единицах	2 ЗЕТ

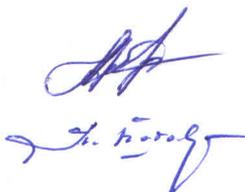
Махачкала 2015

Рабочая программа по дисциплине «**Методы вычислительной физики**» составлена на основании федеральных государственных образовательных стандартов к основной образовательной программе высшего образования подготовки научно-педагогических кадров по направлению 03.06.01 Физика и астрономия, утвержденным приказом Минобрнауки РФ от 30.07.2014 г. № 867;

Составители программы:

К.ф.-м.н., Магомедов М.А.

К.ф.-м.н., Бабаев А.Б.



Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению «Физика и астрономия»	4
2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры	5
3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся	6
3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий	7
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)	7
4.2. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)	8
5. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине	10
5.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине	10
5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы	11
5.2.1. Контрольные вопросы для текущего контроля	12
5.2.2. Критерии оценивания компетенций (результатов)	13
5.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций	13
6. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	14
7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	15
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	15
9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине	15
10. Иные сведения и (или) материалы	16
10.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	16

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы по направлению «Физика и астрономия».

В результате освоения ООП аспирантуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код компетенции	Результаты освоения ООП Содержание компетенций	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ПК-1	Способностью свободно владеть фундаментальными разделами физики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач в физике конденсированного состояния.	<p>Знать:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Теоретические основы и специальный математический аппарат решения задач численного моделирования; 2. Преимущества и недостатки различных методов и схем численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. <p>Уметь:</p> <p>Использовать аппарат высшей математики для построения и анализа различных схем численного моделирования.</p> <p>Владеть:</p> <p>Общими методами построения математических моделей различных физических явлений.</p>
ПК-2	Способностью использовать знания современных проблем физики, новейших достижений физики в своей научно-исследовательской деятельности.	<p>Знать:</p> <p>методы Монте-Карло, алгоритмы в методе Монте-Карло, теорию конечно-размерного скейлинга, факторы влияющие на точность моделирования метода Монте-Карло, анализ ошибок в методе Монте-Карло.</p> <p>Уметь:</p> <p>Разрабатывать эффективные программы для моделирования различных физических систем.</p> <p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Современными методами численного моделирования; 2. Навыками программирования с использованием современных языков высокого уровня и реализации разветвленных алгоритмов численного моделирования.

ПК-4	Способностью использовать свободное владение профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности.	<p>Знать: Способы реализации и программирования различных вычислительных методов.</p> <p>Уметь: Построить математические модели физических систем, поставить численный эксперимент, уметь использовать различные математические модели при моделировании магнитных систем, обрабатывать данные полученные компьютерным моделированием.</p> <p>Владеть: Методами анализа результатов численного моделирования с использованием специализированного программного обеспечения.</p>
------	--	--

2. Место дисциплины в структуре ООП аспирантуры.

Учебная дисциплина «Методы вычислительной физики» является дисциплиной по выбору вариативной части Блока 1 направления подготовки «Физика и астрономия».

Преподавание дисциплины осуществляется на 2-м курсе.

Для успешного освоения дисциплины обучаемый должен обладать знаниями и навыками по основным дисциплинам естественно - научного цикла, иметь опыт работы с вычислительной техникой в объеме, предусмотряемом основной образовательной программой по специальности.

Дисциплина «Методы вычислительной физики» является важной для дальнейшего освоения дисциплин учебного плана подготовки аспирантов по специальности 03.06.01 "Физика и астрономия", требующих интенсивного использования вычислительных методов и средств и нацелена на активизацию научно-исследовательской деятельности аспирантов.

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся.

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 2 зачетные единицы (ЗЕ), 72 часа.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	72
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	18
Аудиторная работа (всего):	18
в т. числе:	
Лекции	12
Практические занятия	
Лабораторные работы	6
Внеаудиторная работа (всего):	
В том числе – индивидуальная работа обучающихся с преподавателем:	
Курсовое проектирование	
Творческая работа (реферат, проект)	
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	54
Вид итогового контроля	Зачет

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Раздел дисциплины	Общая трудоемкость	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости
			Аудиторные учебные занятия		Самостоятельная работа обучающихся	
		Всего	лекции	Лабораторные работы		
1.	Введение.	9	1	1	7	Отчет о выполнении работы
2.	Численный эксперимент.	10	2	1	7	Отчет о выполнении работы
3.	Компьютерное моделирование.	8	1		7	Отчет о выполнении работы
4.	Магнитное квантовое число. Гиромагнитное отношение. Правило Хунда	10	2	1	7	Отчет о выполнении работы
5.	МК методы в статистической физике	8	1		7	Отчет о выполнении работы
6.	Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.	10	2	1	7	Отчет о выполнении работы
7.	Моделирование динамических молекулярных систем	8	1	1	6	Отчет о выполнении работы
8.	Моделирование систем с фрактальным характером	9	2	1	6	Отчет о выполнении работы
9.	Зачет					Итоговый отчет о проделанной работе
10.	Итого	72	12	6	54	

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1.	Введение.	Методы численного эксперимента в физике, применение для решения различных математических задач физики, механики, химии, биологии, кибернетики. Статистическое моделирование. Классы задач, которые решаются методом статистического моделирования. Разновидности численных методов, метод Монте-Карло, и метод молекулярной динамики.
2.	Численный эксперимент.	Природа численного эксперимента. Аналогии между вычислительным и лабораторным экспериментами. Численный анализ, символьные преобразования и управление в реальном времени.
3.	Компьютерное моделирование.	Модели физических систем и компьютерное моделирование. Модели реального объекта в виде алгебраических, дифференциальных и других уравнений. Преимущества и недостатки компьютерного моделирования. Основные этапы компьютерного моделирования. Постановка задачи и её анализ, построение информационной модели, разработка метода и алгоритма реализации компьютерной модели, разработка метода и алгоритма реализации компьютерной модели и проведение эксперимента. Практическое применение компьютерного моделирования.
4.	Магнитное квантовое число. Гиромагнитное отношение. Правило Хунда	Механический и магнитный моменты атома. Магнитные свойства атома, их проявления в физических эффектах и применение в физических исследованиях. Квантовые числа и их физический смысл. Отношение дипольного магнитного момента элементарной частицы к ее механическому моменту. Заполнение электронами энергетических орбиталей в атоме.
5.	МК методы в статистической физике	Применение метода Монте-Карло в статистической физике. Моделирование дискретных случайных величин. Моделирование непрерывных случайных величин. Метод Монте-Карло для микроканонического, канонического и большого канонического ансамбля. Метод Монте-Карло в квантовой статистике. Стандартный алгоритм метода Монте-Карло, кластерные алгоритмы метода Монте-Карло. Случайные и квазислучайные процессы. Моделирование случайных процессов. Марковские процессы, стационарные процессы.
6.	Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.	Методы компьютерного эксперимента. Детерминистические методы. Метод молекулярной динамики. Стохастические методы. Броуновская динамика. Метод Монте-Карло.

7.	Моделирование динамических молекулярных систем	Метод молекулярной динамики. Молекулярная механика. Взаимодействие между атомами, силы межатомного взаимодействия. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциал Леннарда-Джонса. Электростатическое взаимодействие. Ограничения применимости метода молекулярной динамики. Временные и пространственные параметры исследуемых систем.
8.	Моделирование систем с фрактальным характером	Фракталы в физике. Природные объекты, обладающие фрактальными свойствами. Модели роста. Рекурсивная процедура получения фрактальных кривых. Фрактал Мальдерброта, решетка Серпинского. Кривая Коха (снежинка Коха), кривая Леви, кривая Минковского, кривая Гильберта, ломаная (кривая) дракона (Фрактал Хартера-Хейтуэя), кривая Пеано, кривая Мякишева. Методы определения фрактальной размерности.

5. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.

5.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
1.	Введение.	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
2.	Численный эксперимент.	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
3.	Компьютерное моделирование.	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
4.	Магнитное квантовое число. Гиромагнитное отношение. Правило Хунда	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
5.	МК методы в статистической физике	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
6.	Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
7.	Моделирование динамических молекулярных систем	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы
8.	Моделирование систем с фрактальным характером	ПК-1, ПК-2, ПК-4	Контрольные вопросы, отчет о выполнении лабораторной работы

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы

Перечень оценочных средств

№ п/п	Наименование оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде
1.	Отчет о выполнении лабораторной работы.	Средство контроля, организованное как индивидуальное собеседование с каждым аспирантом по теоретической и практической части выполненной работы, а также по данным и результатам оформленного отчета.	Контрольные вопросы для текущего контроля. п. 5.2.1.

5.2.1. Контрольные вопросы для текущего контроля

1. Вычислительная физика: задачи и методы, достижения и проблемы.
2. Теоретическое обоснование метода Монте-Карло и его применение в статистической физике.
3. Использование различных способов выборки в методе Монте-Карло; их достоинства и недостатки.
4. Факторы, влияющие на точность моделирования физических систем методом Монте-Карло.
5. Эффекты, связанные с конечностью размеров моделируемых систем. Проблема эргодичности.
6. Граничные условия.
7. Методы Монте-Карло и динамические процессы.
8. Метод Броуновской динамики.
9. Требования к алгоритмам ММД.
10. Методы молекулярной динамики.
11. Закон взаимодействия в ММД.
12. Теория протекания.
13. Анализ ошибок в методе МК.
14. Кластерные алгоритмы в методе МК.
15. Подпрограмма случайных чисел.
16. Общие сведения о фазовых переходах и критических явлениях.
17. Модель Изинга.
18. Точное решение Модели Изинга в одномерном случае ($d=1$).
19. Расчет энтропии для одномерной модели Изинга.
20. Расчет корреляционной функции для одномерной модели Изинга.
21. Модель Гейзенберга.
22. XY-модель.
23. Модель Поттса.
24. Критические явления в XY-модели, в модели Гейзенберга, в модели Поттса.
25. Теория масштабной инвариантности (Скейлинг). Критические индексы и соотношения между ними.
26. Размерные эффекты. Теория конечно - размерного скейлинга.
27. Моделирование в микрочаноническом ансамбле.
28. Алгоритм Метраполиса.
29. Способы реализации Марковских цепей.
30. Моделирование в большом каноническом ансамбле
31. Новые алгоритмы метода Монте-Карло
32. Фазовые переходы.
33. Критические явления и численный эксперимент.

5.2.2. Критерии оценивания компетенций (результатов)

Код контролируемой компетенции (или её части)	Основные показатели оценки результата	Критерии оценки результата	Оценка
ПК-1			Освоена / не освоена
ПК-2			Освоена / не освоена
ПК-4			Освоена / не освоена

5.3. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций.

Решение практических задач и выполнение лабораторных работ, связанных с реализацией и использованием численных методов, выполняется в течение занятий, а также индивидуально и самостоятельно. После выполнения работы аспиранты предъявляют преподавателю результаты в виде записей, рекомендованных методическими указаниями.

Преподаватель оценивает выполнение работы каждым аспирантом индивидуально по шкале «зачтено/не зачтено» (0/1 балл).

По итогам выполнения аспирантом индивидуально оформляется отчет. Защита проводится в виде индивидуального собеседования с аспирантом по практической части выполненной работы и результатам оформленного отчета.

Ответы на поставленные вопросы аспирант дает в устной форме. Преподаватель подводит итог, т.е. суммирует баллы.

При подведении итогов принимается во внимание оценка освоения компетенций, полученная после защиты выполненных работ.

6. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) Основная литература

1. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. М. 1990 г. т. 1-2;
2. К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М. 1995г.
3. А.С. Кондратьев, В.В. Лаптев. Физика и компьютер. Ленинград. 1989 г.
4. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М. 1990 г.
5. С. Кунин. Вычислительная физика М. 1992 г.
6. А.К. Муртазаев. Программирование, математическое моделирование и автоматизация экспериментов. Методические указания и лабораторные задания. Махачкала. 1992 г.

б) Дополнительная литература

1. К. Биндер. Методы Монте-Карло в статистической физике. М. 1982 г.
2. В.М. Замалин и другие. Методы Монте-Карло в статистической термодинамике. М. 1977 г.
3. И.Л. Соболев. Численные методы Монте-Карло. М. 1962 г.
4. Л.И. Турчак. Основы численных методов. М. 1987 г.
5. Эксперимент на дисплее. Серия “Кибернетика – неограниченные возможности и возможные ограничения”. М. 1989 г.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Вид учебных занятий	Организация деятельности аспиранта
Практические и лабораторные занятия	<p>Задачами практических и лабораторных занятий являются: расширение, детализация и углубление знаний, полученных на лекциях, повышение уровня усвоения материала по предмету, развитие научного мышления, текущая проверка знаний, развитие познавательной активности и навыков самостоятельной работы, а также навыков ведения коллективной работы дискуссии и умения аргументированно отстаивать свои идеи и взгляды.</p> <p>Подготовка к практическим занятиям в качестве одного из этапов должна обязательно включать изучение рекомендованной методической литературы.</p> <p>При выполнении индивидуальных заданий, лабораторных работ необходимо:</p> <ol style="list-style-type: none">1. обосновать каждый этап решения задачи в соответствии с положениями соответствующего раздела теоретического курса2. составить общий план решения задачи3. излагать решение максимально подробно с объяснением всех деталей соответствующих вычислений, преобразований и т.д., <p>Использовать рисунки и схемы, определяющие план решения задач и дальнейшую его реализацию.</p>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

- использование программного обеспечения ПК.
- использование сетевых информационных технологий глобальной (Internet) и локальной (Ethernet) сетей, включая web-технологии.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для материально-технического обеспечения дисциплины «Методы вычислительной физики» используется:

- компьютерный класс Института физики.

10. Иные сведения и (или) материалы

10.1. Перечень образовательных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательные технологии, применяемые на практических и лабораторных занятиях:

1. Технология активного (контекстного) обучения (коллективная работа малыми группами – исследовательская игра: группа разбивается на подгруппы, в каждой из которых назначается руководитель (определяет цели и задачи, назначает ответственных за отдельные задачи, координирует работу и представляет общее решение задачи) и исполнители (решают отдельные задачи);
2. Технология деловой игры (имитационная соревновательная игра: малые группы получают одинаковое задание, распределяются по ролям (руководитель, ответственные исполнители) и выполняют его на скорость и качество, которое оценивается преподавателем);
3. Технология интерактивного обучения (мозговой штурм: группа получает задание, далее предлагается высказывать как можно большее количество вариантов решения, затем из общего числа высказанных идей отбирают наиболее удачные, которые могут быть использованы на практике).

Лист регистрации изменений

Номер измене- ния	Номер пункта (подпункта)			Дата внесения изменения	Изменение	Подпись ответственно- го за внесение изменений
	Изме- нен- ного	Но- вого	Изъ- ято- го			