

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО НТС ИФИБ

Протокол № 3.1

от 30.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Направление подготовки [1] 03.04.02 Физика
(специальность)

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	KCP, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
1	3	108	16	32	0		60	0	3
Итого	3	108	16	32	0	0	60	0	

АННОТАЦИЯ

Курс даёт обзор современных компьютерных и вычислительных технологий, необходимых в работе физика-исследователя в настоящее время: языки программирования и математические пакеты, численные методы, физическое моделирование, использование для научных расчётов суперкомпьютеров и кластеров, обработка и представление экспериментальных данных.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение курса позволит студентам решать стоящие перед ними физические задачи на высоком технологическом и методическом уровне. Преподающиеся основы вычислительных методов и численного моделирования далее могут быть развиты при работе в научной группе

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Курс дает общие сведения по современным компьютерным технологиям, необходимым в работе физика-исследователя. В процессе изучения численных методов решаются задачи из идущих параллельно курсов и из научной группы магистранта, что помогает освоению образовательной программы.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
УКЦ-2 [1] – Способен к самообучению, самоактуализации и саморазвитию с использованием различных цифровых технологий в условиях их непрерывного совершенствования	3-УКЦ-2 [1] – Знать основные цифровые платформы, технологии и интернет ресурсы используемые при онлайн обучении У-УКЦ-2 [1] – Уметь использовать различные цифровые технологии для организации обучения В-УКЦ-2 [1] – Владеть навыками самообучения, самоактуализации и саморазвития с использованием различных цифровых технологий

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
--	---------------------------	--	---

научно-исследовательский				
№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары) / Лабораторные работы, час.	ПК-1 [1] - Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011
	I Семестр			З-ПК-1[1] - знать методы проведения научных исследований и выполнения опытно- конструкторских работ в области физики ; У-ПК-1[1] - уметь самостоятельно формулировать цели, ставить задачи научных исследований в своей профессиональной сфере; решать физическими задачами с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта; В-ПК-1[1] - владеть навыками работы на современной аппаратуре, оборудовании; навыками использования информационных технологий в своей профессиональной области

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел*	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	I Семестр						

1	Базовый	1-8	8/16/0		25	КИ-8	З-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, З-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2
2	Расширенный	9-16	8/16/0		25	КИ-16	З-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, З-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2
<i>Итого за 1 Семестр</i>			16/32/0		50		
	Контрольные мероприятия за 1 Семестр				50	3	З-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, З-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
3	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>1 Семестр</i>	16	32	0
1-8	Базовый	8	16	0
1 - 2	Программирование. Тема 1 является вводной. На практических занятиях восстанавливаются знания и навыки из курсов информатики и численных методов, прослушанных ранее в прежнем вузе. Проводится опрос об известных студентам языках программирования (Pascal, Fortran, C, Java, другие) и математических пакетах (Matlab, MathCAD, Mathematica, Maple, другие), предпочтениях. Определяется уровень подготовки и практического знакомства с численными методами. Домашнее задание – установить у себя математический пакет (Freemat, Maxima) и компилятор знакомого языка программирования (Pascal, Fortran и т.д.), решить простую расчетную задачу. Код программы, компиляция, интерпретация.	Всего аудиторных часов 2 4 0 Онлайн 0 0 0		

	Типы данных: строки, числа (целые, вещественные, комплексные числа), массивы, матрицы, более сложные структуры. Локальные и глобальные переменные. Базовые блоки – циклы, условия, функции.									
3 - 4	<p>Численные методы</p> <p>Обзор возможностей численных методов и математического моделирования для обработки данных и подготовки к эксперименту. Современные достижения методов моделирования.</p> <p>Изучаются базовые численные методы:</p> <p>Аппроксимация и интерполяция экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов.</p> <p>Работа с матрицами. Определитель, обращение матрицы, собственные вектора и собственные значения.</p> <p>Численное интегрирование. Формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона, Буля. Метод Монте-Карло численного интегрирования.</p> <p>Численное дифференцирование, решение дифференциальных уравнений (метод Эйлера, методы Рунге-Кутта)</p> <p>Решение нелинейных уравнений. Метод Ньютона, метод деления отрезка пополам. Метод «стрельбы» для решения краевой задачи.</p> <p>Преобразование Фурье (дискретное, быстрое).</p> <p>Оптимизация параметров и нахождение минимума многомерной сложной функции. Методы случайных блужданий и градиентного спуска.</p>	<p>Всего аудиторных часов</p> <table border="1"> <tr> <td>2</td> <td>4</td> <td>0</td> </tr> </table> <p>Онлайн</p> <table border="1"> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> </table>	2	4	0	0	0	0		
2	4	0								
0	0	0								
5 - 6	<p>Математические пакеты</p> <p>Рассматриваются наиболее известные математические макеты, обсуждаются их особенности и различия в применении. Упоминаются внешние библиотеки к языкам программирования.</p> <p>Система Freemat (Matlab). Построение графиков. Создание собственных функций. Понятие сложной расчетной функции. Оценки количества операций и скорости расчета</p>	<p>Всего аудиторных часов</p> <table border="1"> <tr> <td>2</td> <td>4</td> <td>0</td> </tr> </table> <p>Онлайн</p> <table border="1"> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> </table>	2	4	0	0	0	0		
2	4	0								
0	0	0								
7 - 8	<p>Физическое моделирование.</p> <p>Обсуждаются типичные задачи и стандартные подходы для решения.</p> <p>уравнения движения, уравнение теплопроводности, уравнение Пуассона.</p> <p>метод конечных элементов.</p> <p>квантовые задачи: стационарное и временное уравнения Шрёдингера</p> <p>статистическая физика: распределение Гиббса.</p> <p>Выдается домашнее задание в соответствии с темой научной работы.</p>	<p>Всего аудиторных часов</p> <table border="1"> <tr> <td>2</td> <td>4</td> <td>0</td> </tr> </table> <p>Онлайн</p> <table border="1"> <tr> <td>0</td> <td>0</td> <td>0</td> </tr> </table>	2	4	0	0	0	0		
2	4	0								
0	0	0								
9-16	Расширенный	8	16	0						
9	<p>Сравнительный обзор языков программирования для решения физических задач.</p> <p>Скорость вычислений, скорость разработки,</p>	<p>Всего аудиторных часов</p> <table border="1"> <tr> <td>2</td> <td>2</td> <td>0</td> </tr> </table> <p>Онлайн</p>	2	2	0					
2	2	0								

	масштабируемость, наличие базовых алгоритмов, существование внешних библиотек и их надежность. Применимость для различных задач. Понятие одноразового кода.	0	0	0
10	Автоматизированная обработка текстовых файлов: регулярные выражения Регулярные выражения: возможности, примеры Применение в научных исследованиях	Всего аудиторных часов 0	2	0
		Онлайн 0	0	0
11 - 12	Командная строка и скриптовый язык операционной системы ОС Windows и Unix. BAT, Shell, Perl. Базовые команды. Перенаправление вывода. Регулярные выражения. Возможности автоматизации расчетов	Всего аудиторных часов 2	4	0
		Онлайн 0	0	0
13 - 14	Издательская система LaTeX Структура документа, система команд, особенности применения. Разделение стиля оформления и основного содержания документа.	Всего аудиторных часов 2	4	0
		Онлайн 0	0	0
15 - 16	Суперкомпьютерные технологии Возможности и недостатки. Рейтинг и характеристики современных суперкомпьютеров. Кластеры. Центры коллективного пользования. Графические ускорители. Технологии MPI, OpenMP, AMD Stream, nVidia CUDA, OpenCL.	Всего аудиторных часов 2	4	0
		Онлайн 0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Недели	Темы занятий / Содержание
	<i>1 Семестр</i>
1 - 2	Классическое программирование Разработка программы для перевода чисел между десятичной и двоичной системами счисления. Расчет количества атомов на n-й координационной сфере для заданной кристаллической решетки.
3 - 4	Численные методы Расчет матричного элемента для заданного оператора и волновых функций Решение нелинейного уравнения Шредингера на одномерной оси с заданными начальными условиями.
5 - 6	Физическое моделирование Расчет намагниченности M для ферромагнетика в модели Изинга

7 - 8	Математический пакет Решение задачи в математическом пакете. Сравнение производительности пакета и программы на языке программирования
9 - 10	Визуализация Создание читаемого графика по заданным данным
11 - 12	Программный комплекс Использование скриптового языка или кодогенерации для создания комплекса программ
13 - 14	Издательская система LaTeX Создание научной статьи, главы или презентации по своей текущей задаче в научной группе
15 - 16	Параллельное программирование Решение простой расчётной задачи, делением её на несколько потоков.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На первых занятиях в соответствии с направлением научной работы каждого студента и уровнем владения навыками программирования определяется его индивидуальный профиль изучения и использования компьютерных технологий (т.н. «ящик с инструментами»).

Профиль 1: Численные методы и Fortran

Профиль 2: Физическое моделирование в среде Matlab

Профиль 3: Общий обзор возможностей компьютерных технологий, включая микроконтроллеры, суперкомпьютеры, классические и продвинутые численные методы, но с меньшим объёмом внимания каждой теме.

В соответствии с уровнем подготовки и опытом студента, схема работы на занятиях может включать либо регулярное решение небольших задач по большинству базовых вопросов, либо решение 1 крупной задачи, которую рекомендуется взять по теме исследовательской работы студента. На занятиях контролируется ход решения, даются консультации, оказывается помощь в анализе и определении подходов к решению.

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-1	З-ПК-1	3, КИ-8, КИ-16
	У-ПК-1	3, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-1	3, КИ-8, КИ-16
УКЦ-2	З-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-16
	У-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-16
	В-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-16

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89		B	
75-84		C	
70-74	4 – «хорошо»	D	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
65-69			Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64	3 – «удовлетворительно»	E	
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 512 К59 Алгоритмы численных методов линейной алгебры и их программная реализация : учебно-методическое пособие, Козин Р.Г., Москва: НИЯУ МИФИ, 2012
2. ЭИ П 60 Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB : учебное пособие, Поршнев С. В., Санкт-Петербург: Лань, 2011

3. ЭИ К 78 Компьютерный практикум в среде matlab : учебное пособие для вузов, Красавин А. В., Москва: Юрайт, 2021
4. ЭИ Л12 Лабораторный практикум "Компьютерное моделирование наноструктур" : , Подливаев А.И. [и др.], Москва: НИЯУ МИФИ, 2013
5. ЭИ К 89 Основы LATEX : учеб. пособие, Кузнецов А.В., Москва: НИЯУ МИФИ, 2021
6. 519 Р28 Численные методы : компьютерный практикум, Ращиков В.И., Москва: НИЯУ МИФИ, 2010

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 004 Ф73 Java in a nutshell : , Флэнэген Д., Киев: BHV, 1998
2. 004 О-95 Mathcad Plus 6.0 для студентов и инженеров : , Очков В.Ф., М.: Компьютер Пресс, 1996
3. 51 П38 Mathcad: математический практикум для экономистов и инженеров : Учеб. пособие для вузов, Плис А.И., Сливина Н.А., М.: Финансы и статистика, 1999
4. 004 Д93 Matlab : , Дьяконов В., СПб и др.: Питер, 2001
5. ЭИ Г 38 Виртуальные лаборатории полупроводниковых систем в среде Matlab-Simulink : учебное пособие, Герман-Галкин С. Г., Санкт-Петербург: Лань, 2013
6. 004 Б72 Высокопроизводительные вычислительные системы : , Бобков С.Г., Москва: НИИСИ РАН, 2014
7. 53 К31 Вычислительные методы в квантовой физике : учеб. пособие для вузов, Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: МИФИ, 2005
8. 519 П39 Вычислительные методы. Теория и практика в среде MATLAB: курс лекций : учебное пособие для вузов, Плохотников К.Э., Москва: Горячая линия-Телеком, 2009
9. 004 К53 Искусство программирования Т.1 Основные алгоритмы, , Москва [и др.]: Вильямс, 2011
10. 004 К53 Искусство программирования Т.2 Получисленные алгоритмы, , Москва [и др.]: Вильямс, 2003
11. 004 К53 Искусство программирования Т.3 Сортировка и поиск, , Москва и др.: Вильямс, 2005
12. 53 К31 Квантовые сильнокоррелированные системы: современные численные методы : учебное пособие для вузов, Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: МИФИ, 2007
13. 539.1 Г95 Расчет переноса нейтронов методом Монте-Карло по программе MCU : учебное пособие для вузов, Шкаровский Д.А., Гуревич М.И., Москва: НИЯУ МИФИ, 2012
14. 004 Б26 Современный Фортран : , Бартеньев О.В., Москва: Диалог-МИФИ, 2005

15. 004 Б26 Современный Фортран : , Бартенев О.В., М.: Диалог-МИФИ, 2000
16. 681.3 Д93 Справочник по применению системы РС MatLAB : , Дьяконов В.П., М.: Наука, 1993
17. 536 К31 Численные методы квантовой статистики : , Красавин А.В., Кашурников В.А., Москва: Физматлит, 2010
18. 519 Ч-67 Численные методы решения уравнений с частными производными Ч.1 Разностные схемы для решения уравнения конвективного переноса (одномерное уравнение), , Москва: НИЯУ МИФИ, 2012

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

1. Freemat (<http://freemat.sourceforge.net>)
2. Компилятор Fortran (<http://gcc.gnu.org/wiki/GFortran>)
3. компилятор FreePascal (<http://www.freepascal.org/>)
4. математический пакет Maxima (<http://maxima.sourceforge.org>)

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

1. документация по MPI (<http://www mpi-forum.org/docs/docs.html>)
2. информация о технологии nVidia CUDA (<http://developer.nvidia.com/>)
3. информация о языке OpenCL (<http://www.khronos.org/opencl/>)
4. документация по регулярным выражениям (<http://perldoc.perl.org/perlretut.html>)
5. документация по OpenMP (<http://www.openmp.org/>)
6. информация о технологии AMD APP (<http://developer.amd.com/>)

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

Освоение тем курса позволит студентам решать стоящие перед ними физические задачи на высоком технологическом и методическом уровне. Преподающиеся основы вычислительных методов и численного моделирования далее могут быть развиты при работе в научной группе.

Для успешного освоения дисциплины студентам рекомендуется активно практиковаться во всех изучаемых темах, обсуждать с научным руководителем возможности проведения

дополнительного численного моделирования для повышения уровня результатов НИР, создания визуализаций и презентаций, написания статей в LATE

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Преподавателю курса следует подчёркивать необходимость использования компьютерных технологий при работе над магистерской диссертацией каждого студента, демонстрировать примеры из различных областей современной физики, ссылаясь на соответствующие работы магистров предыдущих потоков, приводить новые данные из научной литературы. Следует выбирать наиболее эффектные достижения.

Курс состоит из двух разделов: Базового и Расширенного. Базовый раздел содержит минимальный обязательный набор компьютерных технологий, необходимый для увереной ориентации в компьютерных технологиях для современных физических исследований: классическое программирование, численные методы, физическое моделирование и математические пакеты. Расширенный раздел даёт краткий обзор современных компьютерных достижений и технологий, с возможностью каждому студенту выбрать наиболее подходящую тему для углубленного изучения. Это даёт возможность каждому студенту приложить основные усилия к освоению методов решения тех задач, которые важны для него на текущем этапе работы над магистерской диссертацией.

На вводном занятии проводится опрос о специальностях и научных направлениях студентов магистратуры – предпочтения к электродинамике, молекулярной физике, квантовой механике, теплофизике и т.д. В соответствии с направлением научной работы каждого студента и уровнем владения навыками программирования определяется его индивидуальный профиль изучения и использования компьютерных технологий (т.н. «ящик с инструментами»).

Профиль 1: Численные методы и Fortran

Профиль 2: Физическое моделирование в среде Matlab

Профиль 3: Общий обзор возможностей компьютерных технологий, включая микроконтроллеры, суперкомпьютеры, классические и продвинутые численные методы, но с меньшим объёмом внимания каждой теме.

В соответствии с уровнем подготовки и опытом студента, схема работы на занятиях может включать либо регулярное решение небольших задач по большинству базовых вопросов, либо решение 1 крупной задачи, которую рекомендуется взять по теме исследовательской работы студента. На занятиях контролируется ход решения, даются консультации, оказывается помощь в анализе и определении подходов к решению.

Автор(ы):

Карцев Петр Федорович, к.ф.-м.н.