

ИНСТИТУТ ЛАЗЕРНЫХ И ПЛАЗМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И НАНОСИСТЕМ

ОДОБРЕНО НТС ЛАПЛАЗ

Протокол № 1/04-577

от 27.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ (ЧАСТЬ 1)

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
4	2	72	15	30	0		27	0	3
Итого	2	72	15	30	0	0	27	0	

АННОТАЦИЯ

Цель преподавания данной дисциплины состоит в изложении начальных сведений о численных методах решения задач математической физики. Акцент курса сделан на кратком и, по возможности наглядном описании методов, характеристике их точности и круга физических задач, для решения которых эти методы применяются. Для некоторых из представленных в курсе методов дается исследование единственности и сходимости решений, которые получаются с их помощью, однако в большинстве случаев детальное математическое обоснование и изучение специальных свойств численных алгоритмов не является нашей задачей и может подробно изучаться в последующих курсах.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Основными задачами освоения дисциплины являются:

- получение базовых представлений о принципах построения численных методов решения задач математической физики и закрепление практических навыков решения физических задач на ЭВМ.
- ознакомление и приобретение студентами навыков программирования на персональном компьютере вычислительных задач необходимых для дальнейшего изучения предметов специализации на более старших курсах.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Изучение дисциплины позволит студентам получить и развить навыки вычислительной работы при решении задач численного моделирования и поможет при выполнении НИР и дипломной работы.

Начальный уровень подготовки студентов, необходимый для успешного освоения данной дисциплины должен включать знание математического анализа, линейной алгебры, теории функций комплексного переменного, обыкновенных дифференциальных уравнений и дифференциальных уравнений в частных производных.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

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	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
--	---------------------------	---	---

		опыта)	
научно-исследовательский			
сбор и обработка научной и аналитической информации с использованием современных программ, средств и методов вычислительной математики, компьютерных и информационных технологий участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в предметной области по профилю специализации;	природные и социальные явления и процессы, объекты техники, технологии и производства, модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области математики, физики и других естественных и социально-экономических наук по профилям предметной деятельности в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства, управления и бизнеса.	ПК-3 [1] - Способен применять численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	3-ПК-3[1] - Знать численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач. ; У-ПК-3[1] - Уметь применять численные методы решения дифференциальных и интегральных уравнений для различных физико-технических задач.; В-ПК-3[1] - Владеть навыками решения дифференциальных и интегральных уравнений численными методами для физико-технических задач.
конструкторско-технологический			
участие в модернизации существующих, разработке и внедрении новых методов контроля качества материалов, производственно-технологических процессов и готовой продукции в сфере высоких и наукоемких технологий	природные и социальные явления и процессы, объекты техники, технологии и производства, модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области математики, физики и других естественных и социально-экономических наук по профилям предметной деятельности в науке, технике,	ПК-7 [1] - Способен к разработке прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	3-ПК-7[1] - Знать текущее положение современных научных достижений, современные методы и алгоритмы для разработки и адаптации прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований. ; У-ПК-7[1] - Уметь применять современные методы и алгоритмы для разработки наукоемкого программного обеспечения.;

	технологиях, а также в сферах наукоемкого производства, управления и бизнеса.		В-ПК-7[1] - Владеть навыками разработки и адаптации прикладного программного обеспечения для проведения научных исследований.
производственно-технологический			
участие в разработке и реализации проектов исследовательской и инновационной направленности в команде исполнителей	природные и социальные явления и процессы, объекты техники, технологии и производства, модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области математики, физики и других естественных и социально-экономических наук по профилям предметной деятельности в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства, управления и бизнеса.	ПК-9 [1] - Способен к математическому и компьютерному моделированию объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.008	3-ПК-9[1] - Знать основные методы и принципы математического и компьютерного моделирования объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области, методы построения математических моделей типовых профессиональных задач, способы нахождения решений математических моделей и содержательной интерпретации полученных результатов. ; У-ПК-9[1] - Уметь использовать математическое и компьютерное моделирование для описания свойств и характеристик объектов, систем, процессов и явлений в избранной предметной области, профессионально интерпретировать смысл полученного результата.; В-ПК-9[1] - Владеть методами математического и компьютерного моделирования объектов, систем,

			процессов и явлений в избранной предметной области и содержательной интерпретации полученных результатов.
--	--	--	---

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для: - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для: - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытий и теорий.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование навыков коммуникации, командной	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для развития навыков коммуникации,

	работы и лидерства (B20)	командной работы и лидерства, творческого инженерного мышления, стремления следовать в профессиональной деятельности нормам поведения, обеспечивающим нравственный характер трудовой деятельности и неслужебного поведения, ответственности за принятые решения через подготовку групповых курсовых работ и практических заданий, решение кейсов, прохождение практик и подготовку ВКР. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для: - формирования производственного коллективизма в ходе совместного решения как модельных, так и практических задач, а также путем подкрепление рационально-технологических навыков взаимодействия в проектной деятельности эмоциональным эффектом успешного взаимодействия, ощущением роста общей эффективности при распределении проектных задач в соответствии с сильными компетентностными и эмоциональными свойствами членов проектной группы.
--	--------------------------	--

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

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

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

* – 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

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Неделя	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
--------	---------------------------	------------	----------------	------------

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

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

По направлению подготовки (специальности) предусматривается широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков студентов. В рамках учебного курса предусмотрено использование лицензионных программных продуктов при проведении самостоятельных расчетов.

7. 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-3	З-ПК-3	З, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-3	З, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-3	З, КИ-8, КИ-15
ПК-7	З-ПК-7	З, КИ-8, КИ-15

ПК-9	У-ПК-7	3, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-7	3, КИ-8, КИ-15
	3-ПК-9	3, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-9	3, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-9	3, КИ-8, КИ-15

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 – <i>«отлично»</i>	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	4 – <i>«хорошо»</i>	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – <i>«удовлетворительно»</i>	E	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			
Ниже 60	2 – <i>«неудовлетворительно»</i>	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.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ К81 Practical course on MatLab for foreign students : , Moscow: National Research Nuclear University MEPHI, 2018
2. ЭИ Л12 Лабораторный практикум "Компьютерное моделирование наноструктур" : , Москва: НИЯУ МИФИ, 2013
3. ЭИ Н 84 Метод акустической эмиссии : , Санкт-Петербург: Лань, 2022
4. ЭИ М 59 Теория принятия управленческих решений : , Санкт-Петербург: Лань, 2022
5. ЭИ Б 30 Численные методы : учебное пособие, Москва: Лаборатория знаний, 2020

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 620 Л12 Лабораторный практикум "Компьютерное моделирование наноструктур" : , Москва: НИЯУ МИФИ, 2013
2. 519 П44 Компьютерный практикум "Основы численных методов решения физических задач" : , А.И.Подливаев, Е.Е.Львов, Л.А.Опёнов, М.: МИФИ, 2004
3. 519 Б30 Численные методы : учеб. пособие для вузов, Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков, М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2006

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

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

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

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

Следует уделять больше внимания самостоятельной работе. В случае затруднений, возникающих при решении тех или иных из заданных на дом задач рекомендуется обратиться к учебникам и задачникам, приведенным в списке литературы, и изучить данную тему более подробно. При подготовке к каждому занятию нужно обязательно повторить материал предыдущих лекций. Кроме того, весьма желательно повторить соответствующий материал из

изученных ранее курсов. При решении задач домашнего задания подразумевается использование языков программирования высокого уровня (FORTRAN, PASCAL и др.)

При выполнении домашнего задания, перед его сдачей следует провести проверку программ, в соответствии с особенностями каждой задачи:

В задаче 1 (вычисление суммы ряда)

при увеличении величины параметра a скорость сходимости суммы ряда падает, а ошибка определения суммы ряда растет. Увеличение ошибки связано с округлением чисел компьютером. Наглядное объяснение причины потери точности дает следующий простой пример. Если к единице один миллиард раз добавить число 10^{-9} , то мы получим число 2, тогда как при выполнении на ЭВМ суммирования чисел с восьмизначной мантиссой округление результатов каждого суммирования приведет к тому, что результат будет равен 1. Уменьшения ошибки такого типа можно добиться, производя суммирование ряда от самых малых слагаемых к большим или выполняя суммирование по группам равновеликих слагаемых.

Если для ряда можно подобрать ряд k , сумма которого известна и который хорошо аппроксимирует ряд при больших k , то скорость сходимости и точность определения суммы ряда можно существенно увеличить, используя метод Куммера.

В задаче 2 (вычисление определенного интеграла) допустима любая из квадратурных формул Ньютона - Котеса: прямоугольников, трапеций, Симпсона и т.п. Согласно этим формулам, искомый интеграл можно приближенно представить в виде одной из формул:

- формула прямоугольников;
- формула трапеций;
- формула Симпсона. При решении данной задачи можно разбивать отрезок $[a, b]$ на равные отрезки $[x_i, x_{i+1}]$.

В задаче 3 (вычисление несобственного интеграла) требуется написать программу для вычисления несобственного интеграла вида $\int_a^\infty f(x) dx$ как функции параметра a .

Подынтегральные функции в данной задаче имеют особенность и подобраны так, что простейший способ интегрирования с помощью формул Ньютона - Котеса не дает необходимой точности (относительной погрешности $\sim 1e-3$), если разбивать область интегрирования на равные отрезки. Такой точности можно достичь, комбинируя следующие приемы: 1) выделить окрестность точки $x = 0$ и в этой окрестности разложить подынтегральную функцию так, чтобы главный член разложения давал основной вклад в интеграл и интегрировался аналитически (все приведенные ниже функции допускают такое разложение); 2) в оставшейся области проводить интегрирование с помощью формул Ньютона - Котеса на переменной сетке (уменьшая длину отрезков по мере приближения к окрестности особой точки).

В задаче 4 (решение трансцендентного уравнения) требуется найти корень уравнения в указанном диапазоне значений x

С точки зрения программирования, простейшим способом определения корней уравнения такого типа является итерационный метод, с использованием обратной функции. Этот метод, однако, имеет существенные недостатки. Он сходится не для всех значений параметра a и зависит от начального приближения x_0 , вследствие чего итерации могут сойтись к корню, лежащему вне заданного в таблице интервала. Метод нахождения корня путем деления отрезка пополам программируется несколько сложнее, однако безусловно применим при решении каждого из приведенных ниже вариантов задачи.

В задаче 5 (поиск минимального и максимального элементов одномерного массива) требуется найти номера $N_{\min}$ и $N_{\max}$ минимального и максимального элементов одномерного массива $F(N)$ в диапазоне $1 \leq N \leq 100000$.

Функция чувствительна к ошибкам округления, возникающим в процессе вычисления ее аргумента. Для корректного решения задачи необходимо правильно выбрать типы переменных, участвующих в определении аргумента этой функции.

В задаче 6 (определение минимального собственного значения эрмитовой матрицы) требуется найти минимальное собственное значение $E_{\min}$ квадратной симметричной действительной матрицы $F(N,M)$; $1 \leq M, N \leq 100$ при заданном значении параметра:

При решении данной задачи не допускается использование стандартного программного обеспечения, предназначенного для определения собственных значений и собственных векторов эрмитовой матрицы. Программа должна быть составлена студентом самостоятельно на основании любого алгоритма поиска собственных значений (методы прямых или обратных итераций, Ланцоша и т.п.)

В задаче 7 (упорядочение элементов одномерного массива) даны элементы одномерного массива $F(N)$ с $N = 100000$, определяемые генератором случайных чисел и распределенные хаотически в интервале от нуля до единицы. Требуется упорядочить этот массив в порядке возрастания его элементов: $F(1) < F(2) < \dots < F(N)$.

При сдаче этого задания необходимо уметь находить величину $F(N_0)$ по заданному номеру элемента N_0 .

Обратить особое внимание на алгоритм упорядочения, поскольку число элементов в массиве может быть увеличено по требованию преподавателя. Вследствие большого размера массива использование простейшего прямого алгоритма упорядочения, требующего N^2 действий, может оказаться недостаточным.

В задаче 8 (решение обыкновенного дифференциального уравнения) на интервале $[0, 2\pi]$ требуется найти решение дифференциального уравнения, периодическое с периодом 2π , а также построить график функции $f(x)$, используя стандартное программное обеспечение. Определить значение $f(a)$ при произвольной величине a путем интерполяции.

Уравнение решается на дискретной сетке в конечных разностях методом прогонки или методом «стрельбы», представляющим искомое решение краевой задачи в виде линейной комбинации нескольких решений задачи Коши.

При определении значения функции в произвольной точке достаточно линейной интерполяции между двумя ближайшими точками сетки.

В задаче 9 (определение корней кубического уравнения) требуется найти корни кубического уравнения $x^3 + ax^2 + bx + c = 0$ с комплексными коэффициентами.

Простейшим способом решения задачи является применение формулы Кардано. Кубическое уравнение известной подстановкой приводится к «неполному» виду.

После нахождения корней уравнения необходимо выполнить проверку каждого из них путем подстановки в исходное уравнение.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

В настоящей дисциплине проводится описание численных методов решения задач, с которыми постоянно сталкиваются исследователи, работающие в области прикладной математики. В некоторые домашние задания по данной дисциплине включен элемент, затрудняющий их тривиальное численное решение (медленная сходимость, плохая обусловленность и т.п.), что часто встречается в реальных задачах.

С целью повышения уровня усвоения студентами материала курса можно порекомендовать на каждой лекции проводить так называемые блиц-опросы, состоящие из 5-10 вопросов по материалам предыдущих занятий.

В 1 задаче домашнего задания (суммирование ряда) при увеличении величины параметра a скорость сходимости суммы ряда падает, а ошибка определения суммы ряда растет. Точность получаемого результата проверить,

- а) изменяя порядок суммирования;
- б) увеличивая количество суммируемых членов ряда.

При решении 2 и 3 задач вычисления определенного и несобственного интеграла допустима любая из квадратурных формул Ньютона - Котеса: прямоугольников, трапеций, Симпсона и т.п. Точность получаемого результата проверить,

- а) увеличивая в несколько раз число отрезков, на которые делится отрезок $[a, b]$;
- б) сопоставляя численный и аналитический результат для тестового варианта расчета – интегрирования полинома – и принимая во внимание, что с помощью формул прямоугольников и трапеций точно интегрируется линейная функция, а с помощью формулы Симпсона – произвольный полином третьей степени

В задаче 4 (решение трансцендентного уравнения) дополнительным вопросом к студенту может быть определение области сходимости различных итерационных методов решения данной задачи.

В задаче 5 (поиск минимального и максимального элементов одномерного массива) для корректного решения необходимо правильно выбрать типы переменных, участвующих в определении аргумента этой функции.

В задаче 6 (определение минимального собственного значения эрмитовой матрицы) При решении данной задачи не допускается использование стандартного программного обеспечения, предназначенного для определения собственных значений и собственных векторов эрмитовой матрицы. Программа должна быть составлена студентом самостоятельно на основании любого алгоритма поиска собственных значений (методы прямых или обратных итераций, Ланцоша, и т.п.)

В задаче 7 (упорядочение элементов одномерного массива) Обратить особое внимание на алгоритм упорядочения, поскольку вследствие большого размера массива использование простейшего прямого алгоритма упорядочения, требующего N^2 действий, может оказаться недостаточным.

В задаче 8 (решение обыкновенного дифференциального уравнения) особое внимание уделить постановке задачи – отличию задачи Коши от краевой задачи. Дать примеры задач с периодическими граничными условиями.

В задаче 9 (определение корней кубического уравнения) После нахождения корней уравнения необходимо выполнить проверку каждого из них путем подстановки в исходное уравнение.

Автор(ы):

Подливаев Алексей Игоревич, к.ф.-м.н., доцент