

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Вычислительные методы и моделирование М1.ДВ.2

Направление подготовки: 011200.68 - Физика

Профиль подготовки: Физика конденсированного состояния

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Егоров А.В.

**Рецензент(ы):**

Еремин М.В.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Тагиров М. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 6105414

Казань

2014

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Егоров А.В. Кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии Отделение радиофизики и информационных систем, Alexander.Egorov@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Вычислительные методы и моделирование" являются изучение подходов к моделированию физических систем и процессов, в особенности - хаотических, получение практических навыков применения методов Монте-Карло.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.ДВ.2 Общенаучный" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.ДВ.2 Общенаучный" основной образовательной программы 011200.68 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Вычислительные методы и моделирование" относится к общенаучному циклу (дисциплина по выбору). Является логическим продолжением дисциплин общей и теоретической физики. От обучаемых требуются теоретические и практические навыки в области численных методов решения дифференциальных уравнений, численных методов линейной алгебры, программирования на языках высокого уровня. Освоение данной дисциплины может быть использовано при работе над магистерской диссертацией

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способностью оперировать углубленными знаниями в области математики и естественных наук
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью к свободному владению знаниями фундаментальных разделов физики и радиофизики, необходимыми для решения научно-исследовательских задач (в соответствии со своим профилем подготовки)
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью к свободному владению профессионально-профилированными знаниями в области информационных технологий, использованию современных компьютерных сетей, программных продуктов и ресурсов Интернет для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки; научно-исследовательская деятельность
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике навыки составления и оформления научно-технической документации, научных отчетов, обзоров, докладов и статей (в соответствии с профилем подготовки)

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью внедрять результаты прикладных научных исследований в перспективные приборы, устройства и системы, основанные на колебательно-волновых принципах функционирования;
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способностью описывать новые методики инженерно-технологической деятельности

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

алгоритмы получения псевдослучайных чисел, способы их тестирования, методы получения псевдослучайных последовательностей с заданными функциями плотности распределения и спектральными характеристиками

2. должен уметь:

самостоятельно реализовать алгоритм Хошена-Копельмана, использовать алгоритм Метрополиса, моделировать процессы в модели Изинга

3. должен владеть:

навыками численного решения алгебраических и дифференциальных уравнений. моделировать поведение систем методом Монте-Карло

4. должен демонстрировать способность и готовность:

самостоятельно реализовать алгоритм Хошена-Копельмана, использовать алгоритм Метрополиса, моделировать процессы в модели Изинга, моделировать поведение систем методом Монте-Карло.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение. Компьютерное моделирование в физике.	2	1	2	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Падение тел.	2	2	2	0	0	
3.	Тема 3. Задача Кеплера	2	3	2	0	0	
4.	Тема 4. Динамика систем многих частиц.	2	4	2	0	0	
5.	Тема 5. Хаотическое движение динамических систем.	2	5	2	0	0	
6.	Тема 6. Волновые явления.	2	6	2	0	0	
7.	Тема 7. Статические поля токов и зарядов.	2	7	2	0	0	
8.	Тема 8. Численное интегрирование.	2	8	2	0	0	
9.	Тема 9. Случайное блуждание	2	9	2	2	0	
10.	Тема 10. Задача о перколяции.	2	10	2	2	0	
11.	Тема 11. Фракталы. Модели кинетического роста.	2	11-12	2	2	0	
12.	Тема 12. Приближение к равновесию	2	13-14	2	2	0	
13.	Тема 13. Микроканонический ансамбль.	2	15-16	2	2	0	
14.	Тема 14. Моделирование канонического ансамбля методом Монте-Карло.	2	17-18	2	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	экзамен
	Итого			28	12	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Введение. Компьютерное моделирование в физике.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Значение компьютеров в физике. Природа численного моделирования. Важность графики. Языки программирования.

##### Тема 2. Падение тел.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Основные понятия. Сила, действующая на падающее тело. Численное решение уравнений. Одномерное движение. Двумерные траектории.

##### Тема 3. Задача Кеплера

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Уравнения движения планет. Движение по окружности. Эллиптические орбиты. Астрономические единицы. Замечания по программированию. Численное моделирование орбиты. Солнечная система.

#### **Тема 4. Динамика систем многих частиц.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Потенциал межмолекулярного взаимодействия. Численный алгоритм. Краевые условия. Программа молекулярной динамики. Измерение макроскопических величин. Простые свойства переноса.

#### **Тема 5. Хаотическое движение динамических систем.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Простое одномерное отображение. Удвоение периода. Универсальные свойства нелинейных отображений. Хаотическое поведение в классической механике.

#### **Тема 6. Волновые явления.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Связанные осцилляторы. Фурье-анализ. Волновое движение. Интерференция и дифракция. Поляризация. Геометрическая оптика.

#### **Тема 7. Статические поля токов и зарядов.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Электрическое поле и потенциал. Магнетизм и силовые линии магнитного поля. Численное решение уравнения Лапласа.

#### **Тема 8. Численное интегрирование.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Простые одномерные методы численного интегрирования. Численное интегрирование одномерных интегралов. Вычисление интегралов методом Монте-Карло. Выборка по значимости. Методы случайного блуждания.

#### **Тема 9. Случайное блуждание**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Одномерное случайное блуждание. Обобщение метода случайных блужданий. Приложения в физике полимеров. Непрерывный предел. Случайные числа.

##### ***практическое занятие (2 часа(ов)):***

Анализ свойств линейного конгруэнтного генератора псевдослучайных чисел.

#### **Тема 10. Задача о перколяции.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Порог перколяции. Маркировка кластеров. Критические показатели и конечномерное масштабирование. Ренорм-группа.

##### ***практическое занятие (2 часа(ов)):***

Преобразование функций плотности распределения вероятностей.

#### **Тема 11. Фракталы. Модели кинетического роста.**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Фрактальная размерность. Регулярные фракталы и самоподобие. Процессы роста фракталов. Клеточные автоматы.

##### ***практическое занятие (2 часа(ов)):***

Реализовать алгоритм Бокса-Мюллера.

#### **Тема 12. Приближение к равновесию**

##### ***лекционное занятие (2 часа(ов)):***

Простая модель приближения к равновесию. Точный перебор. Метод Монте-Карло. Энтропия. Влияние корреляций. Равновесная энтропия.

##### ***практическое занятие (2 часа(ов)):***

Реализовать алгоритм Метрополиса генерации псевдослучайных чисел. Исследовать автокорреляционную функцию.

**Тема 13. Микроканонический ансамбль.****лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Моделирование методом Монте-Карло. Одномерный классический идеальный газ. Температура и канонический ансамбль. Модель Изинга. Поток тепла.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Исследование спектральных характеристик линейного конгруэнтного генератора псевдослучайных чисел.

**Тема 14. Моделирование канонического ансамбля методом Монте-Карло.****лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Алгоритм Метрополиса. Проверка распределения Больцмана. Моделирование двумерной модели Изинга. Фазовый переход. Другие применения модели Изинга. Модели применения модели Изинга.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Реализация алгоритма выращивания стохастического перколяционного кластера.

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Введение. Компьютерное моделирование в физике.	2	1	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
2.	Тема 2. Падение тел.	2	2	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
3.	Тема 3. Задача Кеплера	2	3	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
4.	Тема 4. Динамика систем многих частиц.	2	4	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
5.	Тема 5. Хаотическое движение динамических систем.	2	5	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
6.	Тема 6. Волновые явления.	2	6	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
7.	Тема 7. Статические поля токов и зарядов.	2	7	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
8.	Тема 8. Численное интегрирование.	2	8	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
9.	Тема 9. Случайное блуждание	2	9	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
10.	Тема 10. Задача о перколяции.	2	10	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
11.	Тема 11. Фракталы. Модели кинетического роста.	2	11-12	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
12.	Тема 12. Приближение к равновесию	2	13-14	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
13.	Тема 13. Микроканонический ансамбль.	2	15-16	подготовка к устному опросу	5	устный опрос



N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
14.	Тема 14. Моделирование канонического ансамбля методом Монте-Карло.	2	17-18	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
	Итого				68	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Лекционные и практические занятия проводятся с использованием мультимедийного комплекса, позволяющего наглядно получать студентам всю необходимую информацию. Занятия проводятся в интерактивной форме, позволяющей студентам лучше усваивать материал. Качество обучения достигается за счет использования следующих форм учебной работы: лекции, практические занятия.

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

### Тема 1. Введение. Компьютерное моделирование в физике.

устный опрос, примерные вопросы:

Значение компьютеров в физике. Природа численного моделирования. Важность графики. Языки программирования.

### Тема 2. Падение тел.

устный опрос, примерные вопросы:

Основные понятия. Сила, действующая на падающее тело. Численное решение уравнений. Одномерное движение. Двумерные траектории.

### Тема 3. Задача Кеплера

устный опрос, примерные вопросы:

Уравнения движения планет. Движение по окружности. Эллиптические орбиты. Астрономические единицы. Замечания по программированию. Численное моделирование орбиты. Солнечная система.

### Тема 4. Динамика систем многих частиц.

устный опрос, примерные вопросы:

Потенциал межмолекулярного взаимодействия. Численный алгоритм. Краевые условия. Программа молекулярной динамики. Измерение макроскопических величин. Простые свойства переноса.

### Тема 5. Хаотическое движение динамических систем.

устный опрос, примерные вопросы:

Простое одномерное отображение. Удвоение периода. Универсальные свойства нелинейных отображений. Хаотическое поведение в классической механике.

### Тема 6. Волновые явления.

устный опрос, примерные вопросы:

Связанные осцилляторы. Фурье-анализ. Волновое движение. Интерференция и дифракция. Поляризация. Геометрическая оптика.

### Тема 7. Статические поля токов и зарядов.

устный опрос, примерные вопросы:



Простые одномерные методы численного интегрирования. Численное интегрирование одномерных интегралов.

### **Тема 8. Численное интегрирование.**

устный опрос, примерные вопросы:

Вычисление интегралов методом Монте-Карло. Выборка по значимости. Методы случайного блуждания.

### **Тема 9. Случайное блуждание**

устный опрос, примерные вопросы:

Одномерное случайное блуждание. Обобщение метода случайных блужданий. Приложения в физике полимеров. Непрерывный предел. Случайные числа.

### **Тема 10. Задача о перколяции.**

устный опрос, примерные вопросы:

Порог перколяции. Маркировка кластеров. Критические показатели и конечномерное масштабирование. Ренорм-группа.

### **Тема 11. Фракталы. Модели кинетического роста.**

устный опрос, примерные вопросы:

Фрактальная размерность. Регулярные фракталы и самоподобие. Процессы роста фракталов. Клеточные автоматы.

### **Тема 12. Приближение к равновесию**

устный опрос, примерные вопросы:

Простая модель приближения к равновесию. Точный перебор. Метод Монте-Карло. Энтропия. Влияние корреляций. Равновесная энтропия.

### **Тема 13. Микроканонический ансамбль.**

устный опрос, примерные вопросы:

Моделирование методом Монте-Карло. Одномерный классический идеальный газ. Температура и канонический ансамбль. Модель Изинга. Поток тепла.

### **Тема 14. Моделирование канонического ансамбля методом Монте-Карло.**

устный опрос, примерные вопросы:

Алгоритм Метрополиса. Проверка распределения Больцмана. Моделирование двумерной модели Изинга. Фазовый переход. Другие применения модели Изинга. Модели применения модели Изинга.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

Вопросы экзаменационных билетов

1. Динамика систем многих частиц. Потенциал Леннарда Джонса. Алгоритм Верле.

Тороидальные граничные условия. Кристаллизация двумерного газа.

2. Методы Монте-Карло. Центральная предельная теорема. Эргодическая гипотеза.

Генераторы псевдослучайных чисел. Получение заданных функций распределения. Алгоритм Метрополиса.

3. Численное вычисление интегралов. Формула Симпсона. Вычисление многомерных интегралов методом Монте-Карло. Выборка по значимости.

4. Задача о перколяции. Маркировка кластеров. Алгоритм Хошена-Копельмана.

5. Регулярные фракталы и самоподобие. Клеточные автоматы. Плитка Пенроуза.

6. Канонический ансамбль. Моделирование методом Монте-Карло двумерной модели Изинга. Критические явления.

7. Проблема TSP. Метод симулированного отжига. Метод эластичной нити.

8. Численные методы решения дифференциальных уравнений. Моделирование колебательных систем. Уравнение Дуффинга, уравнение Матье.

9. Статические поля зарядов и токов. Численное решение уравнения Лапласа. Расчет магнитных полей, создаваемых соленоидальной и седловидной катушкой. (Датчики ЯМР-томографа).

### 7.1. Основная литература:

1. Пантина, И. В. Вычислительная математика [Электронный ресурс] : учебник / И. В. Пантина, А. В. Синчуков. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: МФПУ Синергия, 2012. - 176 с.  
<http://znanium.com/bookread.php?book=451160>
2. Численные методы и программирование: Учебное пособие / В.Д. Колдаев; Под ред. Л.Г. Гагариной. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 336 с.  
<http://znanium.com/bookread.php?book=452274>
3. Калиткин, Н. Н. Численные методы: учеб. пособие / Н. Н. Калиткин. ? 2-е изд., исправленное. ? СПб.: БХВ-Петербург, 2011. ? 586 с.  
<http://znanium.com/bookread.php?book=350803>

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Компьютерное моделирование в физике : В 2-х ч. : перевод с английского. Ч. 1 / Х. Гулд, Я. Тобочник ; Пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко .? Москва : Мир, 1990 .? 349 с. : ил.
2. Компьютерное моделирование в физике : В 2-х ч. : перевод с английского. Ч. 2 / Х. Гулд, Я. Тобочник ; Пер. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко .? Москва : Мир, 1990 .? 400 с. : ил.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

казанский университет - [www.kpfu.ru](http://www.kpfu.ru)  
миннауки и образования - [www.edu.ru](http://www.edu.ru)  
научная поисковая система - [www.scopus.com](http://www.scopus.com)  
свободная энциклопедия - [ru.wikipedia.org](http://ru.wikipedia.org)  
электронная библиотека - [ru.wikipedia.org](http://ru.wikipedia.org)

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Вычислительные методы и моделирование" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

мультимедийный комплекс для чтения лекций

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.68 "Физика" и магистерской программе Физика конденсированного состояния .

Автор(ы):

Егоров А.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Еремин М.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.