

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
**«Владимирский государственный университет**  
**имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»**  
(ВлГУ)



УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебно-методической работе

А.А.Панфилов

« 07 » 04

2015г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### Вычислительная физика

(наименование дисциплины)

Направление подготовки 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

Профиль/программа подготовки

Уровень высшего образования бакалавриат

Форма обучения очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
5	6/216	36	54	-	90	Зачёт (36)
Итого	6/216	36	54	-	90	Зачёт (36)

Владимир 2015

## **1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Целью освоения дисциплины (модуля) **Вычислительная физика** является: получение студентами практических навыков в решения физических задач в области нанотехнологий численными методами.

Задачами курса являются:

Изучение и освоение численных методов решения линейных и нелинейных уравнений, задач линейной алгебры, численного дифференцирования и интегрирования.

Решение задач математической физики: обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных, приобретение и совершенствование практических навыков программирования на высокуюровневом языке в интерактивной среде Matlab.

## **2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО**

Дисциплина «Вычислительная физика» относится к дисциплинам по выбору вариативной части основной профессиональной образовательной программы по направлению 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника.

Изучение дисциплины базируется на следующих дисциплинах образовательной программы бакалавриата: «Физика», «Математика» «Теория вероятностей и математическая статистика» «Уравнения математической физики» базовой части цикла математических и естественнонаучных дисциплин, «Квантовая и статистическая физика» вариативной части математического и естественного цикла «Компьютерное сопровождение научных исследований» дисциплин по выбору, которые преподаются обучающимся в предыдущих семестрах программы подготовки.

Успешное освоение дисциплины «Вычислительная физика» предполагает наличие у обучающихся знаний, умений и готовностей, полученных при изучении указанных дисциплин и в ходе прохождения учебной практики. Освоение дисциплины «Вычислительная физика» необходимо для изучения курсов «Теория эксперимента», «Физико-химические основы процессов микро- и нанотехнологии» и «Квантовая и оптическая электроника», а также для эффективного выполнения научно-исследовательской работы, выполняемой обучающимися в девятом семестре, и дальнейшей подготовки выпускной квалификационной работы и др.

## **3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**ОПК-1:** способностью представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики.

**ОПК-2:** способностью выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат

**ПК-1:** готовностью проводить экспериментальные исследования по синтезу и анализу материалов и компонентовnano- и микросистемной техники.

**ПК-3** готовностью анализировать и систематизировать результаты исследований, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

### **1) Знать:**

- адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики (ОПК-1);
- естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2);

- базовые экспериментальные исследования по синтезу и анализу материалов и компонентов нано- и микросистемной техники (ПК-1).

- Методы анализа и систематизации результатов исследований в области микро и нано технологий, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций (ПК-3).

**2) Уметь:**

- применять знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики адекватные современному уровню знаний в области нано- и микросистемной техники (ОПК-1);

- выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2);

- проводить экспериментальные исследования по синтезу и анализу материалов и компонентов нано- и микросистемной техники. (ПК-1).

- анализировать и систематизировать результаты исследований, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций (ПК-3).

**3) Владеть:**

- методами естественных наук и математики адекватными современному уровню знаний в области нано- и микросистемной техники (ОПК-1);

- методами выделения естественнонаучной сущности проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2);

- навыками проведения экспериментальных исследований по синтезу и анализу материалов и компонентов нано- и микросистемной техники. (ПК-1);

- методами анализа и систематизации результатов исследований, навыками представления материалов в виде научных отчетов, публикаций, презентаций (ПК-3).

#### **4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Объем учебной работы, с применением интерактивных методов (в часах / %)	Формы текущего контроля успеваемости <i>(по неделям семестра)</i> , форма промежуточной аттестации <i>(по семестрам)</i>	
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	СРС	КП / КР		
1	Качественные и аналитичес- кие методы в классической физике	5	1-6	10	18			20		6/30%	
2	Компьютерное моделирова- ние систем большого числа частиц	5	7-11	10	14			24		8/33%	Рейтинг 1

3	Моделирование квантовых систем	5	12-16	10	14			22		6/27%	Рейтинг 2
4	Методы расчета характеристик наноструктур.	5	17-18	6	8			24		8/33%	Рейтинг 3
Всего				36	54	-		90		28/31%	Зачёт(36)

## СОДЕРЖАНИЕ КУРСА ЛЕКЦИИ

Темы лекций, разделы дисциплины	Кол-во часов
<b>Раздел 1. Качественные и аналитические методы в классической физике</b>	<b>10</b>
Лекция 1. Вычислительная физика и ее роль в современной науке. Обзор основных численных методов в физике.	2
Лекция 2. Качественные методы исследования физических процессов	2
Лекция 3. Численные методы решения нелинейных алгебраических уравнений.	2
Численные методы решения систем алгебраических уравнений.	
Лекция 4. Вычисление определенных интегралов. Численные методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (Задача Коши).	2
Лекция 5. Преобразование Фурье. Колебательные и волновые явления.	2
<b>Раздел 2. Компьютерное моделирование систем большого числа частиц</b>	<b>10</b>
Лекция 6. Математическая модель статистической системы. Оценка макроскопических характеристик статистической системы	2
Лекция 7. Моделирование фазовых переходов. Критические явления.	2
Лекция 8. Нахождение положения равновесия системы взаимодействующих частиц методом молекулярной динамики и методом Монте-Карло.	2
Лекция 9. Броуновское движение. Моделирование одно-, дву- и трехмерных случайных блужданий.	2
Лекция 10. Моделирование процессов релаксации статистической системы.	2
<b>Раздел 3. Моделирование квантовых систем</b>	<b>10</b>
Лекция 10. Стационарное уравнение Шредингера.	2
Лекция 11. Колебания молекул в квазиклассическом приближении.	2
Лекция 12. Нестационарное уравнение Шредингера.	2
Лекция 13. Оценка энергии основного состояния квантовой системы методом Монте-Карло	2
Лекция 14. Вариационные методы Монте-Карло для оценки энергии основного состояния квантовой системы	2
<b>Раздел 4. Методы расчета характеристик наноструктур.</b>	<b>6</b>
Лекция 15. Математические модели 1D, 2D, 3D структур.	2
Лекция 16. Метод Хартри-Фока и функционал плотности.	2
Лекция 18. Фрактальные свойстваnano структур	2
<b>Итого</b>	<b>36</b>

## Практические занятия.

Темы лекций, разделы дисциплины	Кол-во часов
<b>Раздел 1. Качественные и аналитические методы в классической физике.</b>	<b>18</b>
1. Введение в Матлаб.	2
2. Графические средства и средства визуализации.	2
3. Представление электромагнитных полей.	2
4. Реализация качественных методов исследования физических процессов. В среде Матлаб. Фазовые портреты	2

Темы лекций, разделы дисциплины	Кол-во часов
5. Численные методы решения нелинейных алгебраических уравнений. Численные методы решения систем алгебраических уравнений.	2
6. Вычисление определенных интегралов. Численные методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (Задача Коши).	2
7. Исследование механических и электромагнитных колебаний.	2
8. Дискретное преобразование Фурье.	2
9.Фурье анализ переходных процессов электромагнитных колебаний. БПФ.	2
<b>Раздел 2. Компьютерное моделирование систем большого числа частиц.</b>	<b>14</b>
10. Численный алгоритм решения системы уравнений движения в газе.	2
11. Оценка коэффициентов переноса в методе молекулярной динамики.	2
12. Алгоритм метода Монте-Карло.	2
13. Алгоритмы генерации случайных чисел с равномерным законом распределения.	2
14. Моделирование процесса релаксации в идеальном газе 1.	2
15. Моделирование процесса релаксации в идеальном газе 2.	2
16. Моделирование двумерной модели Изинга методом канонического ансамбля.	2
<b>Раздел 3. Моделирование квантовых систем.</b>	<b>14</b>
17. Моделирование энергетического спектра электрона в твёрдом теле.	2
18. Моделирование энергетического спектра электрона в одномерной потенциальной яме с бесконечными стенками.	2
19. Моделирование энергетического спектра электрона в одномерной потенциальной яме со стенками конечной высоты.	2
20. Моделирование энергетического спектра электрона вблизи потенциальной ступеньки.	2
21. Энергия колебания молекул в квазиклассическом приближении.	2
22. Оценка энергии основного состояния электрона в атоме водорода методом Монте-Карло	2
23. Оценка энергии основного состояния электронов в многоэлектронных атомах.	2
<b>Раздел 4. Методы расчета характеристик наноструктур.</b>	<b>8</b>
24. Моделирование движения электрона в слоистых квантово-размерных структурах.	2
25. Моделирование движения электрона через двухбарьерную квантово-размерную структуру.	2
26. Моделирование движения электрона приложением постоянного электрического поля перпендикулярно слоям.	2
27. Заключительное занятие.	2
<b>Итого</b>	<b>54</b>

## 5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Проведение лекционных занятий обеспечено специализированными аудиториями, оборудованными компьютерами и электронными проекторами, что позволяет сопровождать чтение лекций демонстрацией компьютерных слайдов.

В рамках лекционного курса используются также следующие технологии:

Технология проблемного обучения (case study). При рассмотрении вопросов практического применения рассмотренного теоретического материала, используется диалог со студентами на предмет возможных способов решения поставленной задачи.

Встречи с учеными и специалистами, работающими в направлении развития материалов и компонентов нано- и микросистемной техники.

Проведение лекционных занятий обеспечено специализированными аудиториями, оборудованными компьютерами и электронными проекторами, что позволяет сопровождать чтение лекций демонстрацией компьютерных слайдов.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах составляет не менее 20% аудиторных занятий.

## 6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Текущий контроль успеваемости является распределённым и основан на оценке нескольких составляющих.

1. Результаты рейтинг-контроля.
2. Выполнение практических заданий.

### *Вопросы рейтинг-контроля №1*

1. Первый запуск американской ракеты на Венеру был неудачным из-за
  - а) не учета в соответствующей математической модели давления света
  - б) ошибки в программе расчета траектории движения
  - в) задания неправильных начальных условий
  - г) ошибки во времени запуска.
2. При уменьшении вдвое шага интегрирования точность решения ОДУ четырехточечным методом Рунге-Кутты увеличивается в
  - а) 4 раза
  - б) 8 раз
  - в) 32 раза
  - г) 10 раз.
3. Четырехточечный метод Рунге-Кутты пригоден для решения ОДУ
  - а) только первого порядка
  - б) только второго порядка
  - в) только четвертого порядка
  - г) любого порядка.
4. Данна 4x4 матрица, у которой отличны от нуля только элементы  $A[1,2]=1$ ,  $A[2,1]=-1$ ,  $A[3,4]=1$ ,  $A[4,4]=1$ . Какой из нижеперечисленных векторов является ее собственным вектором?
  - а) [0,1,0,1]
  - б) [1,1,1,1]
  - в) [0,0,1,1]
  - г) [0,0,1,-1].
5. Для приведения симметричной 4x4 матрицы к диагональному виду методом Якоби необходимо сделать
  - а) 4 шага
  - б) 6 шагов
  - в) 16 шагов
  - г) количество шагов заранее предсказать нельзя.
6. В методе Якоби собственные векторы исходной матрицы находятся как
  - а) столбцы матрицы, приведенной к диагональному виду
  - б) столбцы матрицы плоского вращения
  - в) столбцы матрицы ортогонального преобразования, которая приводит исходную матрицу к диагональному виду
  - г) в готовом виде собственные векторы метод Якоби не дает.
7. Метод Якоби применяется для нахождения собственных значений
  - а) симметричных матриц
  - б) ортогональных матриц
  - в) унитарных матриц
  - г) любых квадратных матриц.
8. При приведении исходной матрицы к диагональному виду с помощью метода Якоби сумма всех диагональных элементов на каждом шаге метода Якоби
  - а) уменьшается
  - б) увеличивается

- в) не изменяется  
г) может как уменьшаться, так и увеличиваться.
9. По следующим данным  $y(0)=2$ ,  $y(1)=-2$ ,  $y(-1)=2$ ,  $y(2)=-4$  был построен интерполяционный полином. Какой из перечисленных ниже полиномов является таковым?
- а)  $x^3-x^2+x-2$
  - б)  $-x^3+2*x^2-5*x+2$
  - в)  $x^3-2*x^2-3*x+2$
  - г)  $5*x^3-7*x+2$ .
10. По следующим данным  $y(0)=2$ ,  $y(1)=-2$ ,  $y(-1)=2$ ,  $y(2)=-4$  методом наименьших квадратов был построен полином первой степени. Какой из перечисленных ниже полиномов наиболее близок (в смысле метода наименьших квадратов) к правильному ответу?
- а)  $x+1$
  - б)  $2*x$
  - в)  $-2*x+1$
  - г)  $-x+2$ .
11. Методы Рунге-Кутты по сравнению с методами прогноза и коррекции являются
- а) более быстрыми
  - б) более точными
  - в) более удобными при изменении шага интегрирования
  - г) более устойчивыми.
12. Какой из перечисленных ниже методов является методом решения обыкновенных дифференциальных уравнений.
- а) метод Зейделя
  - б) метод Нумерова
  - в) метод Симпсона
  - г) метод Жордана.
13. Какой из перечисленных ниже методов является методом вычисления определённых интегралов?
- а) метод Рунге-Кутты
  - б) метод Жордана
  - в) метод Милна
  - г) метод Симпсона.
14. При уменьшении вдвое шага интегрирования точность решения дифференциального уравнения четырёхточечным методом Рунге-Кутты увеличивается в
- а) 4 раза
  - б) 8 раз
  - в) 32 раза
  - г) 10 раз.
15. В методах прогноза-коррекции формула для коррекции применяется для
- а) уточнения решения дифференциального уравнения в данной точке, которое получается по формуле прогноза
  - б) для обеспечения устойчивости вычислительного процесса
  - в) для изменения шага интегрирования
  - г) для проверки правильности полученного решения
16. Некоторый определённый интеграл был вычислен дважды по методу Симпсона: один раз с шагом  $h$ , а второй – с шагом  $h/2$ . Во сколько раз ожидается получить более точное значение этого интеграла во втором случае по сравнению с первым случаем?
- а) в 2 раза
  - б) в 8 раз
  - в) в 32 раза
  - г) в 1024 раза.

### *Вопросы рейтинг-контроля №2*

Задание 1. Найти площадь круга по методу Монте-Карло, проверяя попадание внутрь круга путем использования уравнения окружности. Исследовать зависимость точности определения площади от числа испытаний ("выстрелов").

Задание 2. Найти площадь равностороннего треугольника по методу Монте-Карло, проверяя попадание внутрь треугольника путем анализа цвета фигуры. Исследовать зависимость точности определения площади от числа испытаний ("выстрелов")

Задание 3. Исследовать процесс накопления зерна на некоторой линии  $+1 > x > -1$ , считая, что плотность вероятности  $p(x)$  попадания отдельного зерна на эту линию зависит от  $x$  следующим образом: при  $0 > x > -1$   $p(x) = 1+x$ , при  $1 > x > 0$   $p(x) = 1-x$ , при  $x > 1$   $p(x) = 0$ . Изображать упавшие зерна кружками (при соответствующих значениях "x")

Задание 4. Вычислить и изобразить траекторию частицы при наличии случайных столкновений, приводящих к изменению направления движения частицы на произвольный угол (в интервале от 0 до  $2\pi$ ) без изменения модуля скорости. Силовые поля отсутствуют. Средняя длина пробега равна  $L$ . Проследить изменение во времени смещения частицы от начальной точки, построив график зависимости смещения как функции от прошедшего времени

Задание 5. На однородную бесконечную пластинку толщиной  $d$  вдоль оси  $X$  падает поток нейтронов. При столкновении с атомом вещества с вероятностью  $P_1$  нейtron поглощается, а с вероятностью  $P_2$  упруго рассеивается, причем все направления движения нейтрона после рассеяния равновероятны. Средняя длина свободного пробега равна  $L$ . Промоделировав траектории движения  $N = 100$  нейтронов, определить, сколько нейтронов  $N_1$  поглотилось в пластинке, сколько нейтронов  $N_2$  отразилось от пластинки и сколько нейтронов  $N_3$  прошло сквозь пластинку. Меняя отношение  $L/d$  от 0,1 до 10, выяснить его влияние на значения  $N_1, N_2, N_3$ .

Задание 6. Вычислить и изобразить траекторию движения заряженной частицы в однородном магнитном поле при наличии столкновений.

Задание 7. Нарисовать карту силовых линий и эквипотенциалей поля: а) точечного заряда, расположенного в точке  $x=0, y=0$ , двух одинаковых разноименных зарядов.

Задание 8. Нарисовать карту силовых линий поля произвольного числа зарядов, расположенных в плоскости экрана случайным образом. Изобразить распределение потенциала произвольного числа зарядов, расположенных в плоскости экрана (использовать цветовое кодирование различных значений потенциала)

### *Вопросы рейтинг-контроля №3*

1. Теоретическое обоснование метода Монте-Карло и его применение в статистической физике.
2. Использование различных способов выборки в методе Монте-Карло; их достоинства и недостатки.
3. Факторы, влияющие на точность моделирования физических систем методом Монте-Карло.
4. Эффекты, связанные с конечностью размеров моделируемых систем. Проблема эргодичности.
5. Границные условия.
6. Методы Монте-Карло и динамические процессы.
7. Метод Броуновской динамики.
8. Требования к алгоритмам ММД.
9. Методы молекулярной динамики.
10. Закон взаимодействия в ММД.
11. Теория протекания.
12. Анализ ошибок в методе МК.
13. Кластерные алгоритмы в методе МК.
14. Подпрограмма случайных чисел.
15. Общие сведения о фазовых переходах и критических явлениях.

18. Модель Изинга.
19. Точное решение Модели Изинга в одномерном случае ( $d=1$ ).
20. Расчет энтропии для одномерной модели Изинга.
21. Расчет корреляционной функции для одномерной модели Изинга.
22. Модель Гейзенберга.
23. XY-модель.
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 микроканоническом ансамбле.
28. Алгоритм Метраполиса.
29. Способы реализации Марковских цепей.

### **CPC**

1. Флопом называется .....
2. Погрешности округления зависят от ...
3. Погрешности метода -
4. Математическая модель - .
5. В основе численной модели лежит ...
6. Адекватность математической модели заключается в ....
7. Правильным определением алгоритма является ...
8. Основными этапами вычислительного эксперимента являются ...
9. Метод деления отрезка пополам решения нелинейных алгебраических уравнений сходится при условии ...
10. Вычисление определенного интеграла методом Симпсона имеет ... порядок точности по шагу.
11. Линейная интерполяция функции, заданной в узлах сетки имеет вид ...
12. Билинейная интерполяция функции, заданной в узлах сетки имеет вид ...
13. В основе сплайн-интерполяции лежит ....
14. Следующее выражение описывает метод ..... интегрирования ОДУ.
15. Метод Эйлера численного решения ОДУ имеет ..... порядок точности по шагу.
16. Следующее выражение описывает метод ..... интегрирования ОДУ.
17. Следующее выражение описывает метод ..... интегрирования ОДУ.
18. Уравнение Пуассона является уравнением .....
19. К какому типу уравнений в частных производных относится уравнение теплопроводности?
20. К какому типу уравнений в частных производных относится уравнение диффузии?
21. Точность расчетов на ЭВМ.
22. Визуализация результатов вычислений (пакет Матлаб).
23. Методы решения нелинейных уравнений.
24. Методы вычисления определенных интегралов.
25. Интерполяция функций.
26. Конечно – разностные методы решения дифференциальных уравнений.  
Устойчивость разностных схем.
27. Начальная задача (задача Коши). Методы решения систем ОДУ.
28. Решение нерелятивистского уравнения движения.
29. Численные методы решения уравнений в частных производных.
30. Методы решения уравнения диффузии.
31. Методы решения уравнение теплопроводности.
32. Численные методы решения уравнения Пуассона и уравнения Лапласа.
33. Методы расчета магнитных полей, создаваемых осесимметричными катушками и постоянными магнитами.

**Вопросы к зачёту:**

1. Алгоритмы Эйлера и Рунге – Кутта. – Фазовая траектория.
2. Устойчивость решения. Финитные и инфинитные движения. Сепаратриса. Притягивающий и отталкивающий центры.
3. Движение заряда магнитном поле, в скрещенных однородных электрическом и магнитном полях.
4. Силовые линии электрического поля разных источников.
5. Силовые линии магнитного поля.
6. Линии равного потенциала для поля точечных зарядов, расположенных в одной плоскости.
7. Силовые линии как изолинии потока для аксиально- симметричных источников поля.
8. Генератор случайных чисел. Случайные числа, распределенные с равномерной плотностью вероятности. Алгоритм получения случайных чисел.
9. Вычисление площадей методом Монте-Карло.
10. Моделирование столкновений. Определение длины свободного пробега.
1. Некоторые динамические модели: уравнения гармонического осциллятора и математического маятника; уравнения, описывающие движение планеты в гравитационном поле Солнца. Проблема трех тел.
2. Задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка. Метод Эйлера.
3. Четырехточечный метод Рунге-Кутты. Точность и устойчивость численных методов решения ОДУ.
4. Задача о малых колебаниях механических систем. Итерационный метод Якоби нахождения собственных значений и собственных векторов симметричной матрицы. Сходимость метода Якоби.
5. Критерии качества приближения функций (критерий, используемый в методе рядов Тейлора, критерий метода интерполяции, критерий метода наименьших квадратов, минимаксный критерий Чебышева, критерий приближения сплайнами).
6. Интерполяционный полином Лагранжа.
7. Интерполяционный полином Ньютона для равноотстоящих узлов.
8. Ошибки интерполяционных формул. Явление Рунге.
9. Полиномиальное приближение с помощью метода наименьших квадратов. Нормальная система уравнений. Трудности метода наименьших квадратов при стремлении к бесконечности числа наблюдений.
10. Метод наименьших квадратов в случае нелинейной зависимости аппроксимирующей функции от искомых неопределенных параметров. Многоэкстремальные задачи.
11. Простейшие формулы интегрирования (методы прямоугольников и трапеций). Метод Симпсона. Формулы Ньютона-Котеса. Составные и единые формулы интегрирования.
12. Метод аналитической замены для вывода квадратурных формул.
13. Метод моментов для вывода квадратурных формул.
14. Метод рядов Тейлора для вывода квадратурных формул.
15. Метод Филона интегрирования быстро осциллирующих функций.
16. Метод интегрирования Гаусса с плавающими узлами.
17. Вычисление несобственных интегралов.
18. Простейший метод прогноза и коррекции. Формулы прогноза. Переход от задачи Коши для ОДУ первого порядка к интегральному уравнению для вывода семейства формул коррекции.
19. Метод Милна. Стартовые методы.
20. Каноническая форма систем ОДУ первого порядка. Метод Эйле-ра, методы прогноза и коррекции и метод Рунге-Кутты для решения систем ОДУ первого порядка в

канонической форме. Переход от ОДУ высших степеней к канонической форме уравнений первого порядка.

21. Формулы численного дифференцирования и их вывод методом неопределенных коэффициентов.

22. Дифференциальные уравнения второго порядка без первой производной и их роль в классической и квантовой физике. Метод Нумерова.

23. Метод стрельбы и простейший сеточный метод для решения линейной краевой задачи. Повышение точности сеточного метода за счет перехода к более точной аппроксимации второй производной. Регулярные и нерегулярные узлы сетки.

24. Простейшее уравнение теплопроводности. Выбор сетки и шаблона. Вывод разностной схемы и соответствующего ей порядка аппроксимации.

25. Явные и неявные схемы.

26. Понятие об априорном исследовании устойчивости и сходимости разностных схем.

27. Методы последовательного исключения неизвестных Гаусса и Жордана.

28. Применение метода Жордана к нахождению обратных матриц.

29. Метод Холецкого.

30. Метод простой итерации и метод Зейделя.

31. Методы бисекции, хорд, Ньютона. Метод простой итерации. Понятие о сложных итерациях.

32. Метод Ньютона для решения систем нелинейных уравнений.

33. Методы координатного и градиентного спуска. Овражные ситуации. Метод случайного спуска.

34. Общее понятие о задачах и методах математического программирования (линейное, выпуклое, параметрическое, целочисленное, динамическое программирование).

## **7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

а) основная литература\*:

1. Вычислительные методы. Теория и практика в среде MATLAB: курс лекций [Электронный ресурс]: Учебное пособие для вузов / Плохотников К.Э. - 2-е изд., испр. - М.: Горячая линия - Телеком, 2013. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785991203548.html>.

2. Методы вычислительной электродинамики [Электронный ресурс] / Григорьев А.Д. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922114509.html>.

3. Лужков А.А. Основы вычислительной физики [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие/ Лужков А.А., Сельдяев В.И.— Электрон. текстовые данные.— СПб.: Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, 2013.— 105 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/22560>.— ЭБС «IPRbooks»

б) дополнительная литература:

1. Численные методы квантовой статистики [Электронный ресурс] / Каширников В.А., Красавин А.В. - М. : ФИЗМАТЛИТ, 2010. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922112130.html>.

2. "Численные методы решения задач диффузии: Метод. указания к компьютерному практикуму по курсу "Уравнения математической физики" [Электронный ресурс] / Титов К.В. - М. : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009." - [http://www.studentlibrary.ru/book/bauman\\_0434.html](http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0434.html).

3. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики [Электронный ресурс] / Гордин В.А. - М. : ФИЗМАТЛИТ, 2010. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111300.html>.

в) периодические издания:

1. [www.ufn.ru](http://www.ufn.ru);

2. <http://crm.ics.org.ru/journal/page/crminfo/>

3. <http://cyberleninka.ru/journal/n/mathematicheskie-struktury-i-modelirovaniye>

в) интернет-ресурсы

1. [www.exponenta.ru](http://www.exponenta.ru)
2. [http://nanorf.ru/science.aspx?cat\\_id=4353](http://nanorf.ru/science.aspx?cat_id=4353)
3. <http://math.semestr.ru/group/sampling-method.php>.

## **8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Преподавание дисциплины предусматривает применение мультимедийных презентаций и компьютерных симуляций, что обеспечивается проведением занятий в оборудованных мультимедийным оборудованием аудиториях кафедры ФиПМ (ауд. 420-3, ауд. 430-3).

Для обеспечения проведения практических работ имеются компьютерные классы кафедры ФиПМ (лаб. 511-3, лаб. 100-3).

Для обеспечения проведения лабораторных работ имеются специализированные учебно-научные лаборатории, оборудованные современным оборудованием (лаб. 107-3, 107a-3, 419-3, 123-3) и пакетом прикладных программ Matlab.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 28.03.01. Нанотехнологии и микросистемная техника

Рабочую программу составил профессор кафедры ФиПМ Бутковский О.Я.  
(ФИО, подпись)

Рецензент

(представитель работодателя) м.сисл. науч.-методич. инф. ФКП "ППРадуга" Анастасия Денисовна  
(место работы, должность, ФИО, подпись)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ

Протокол № 11 от 07.04.15 года

Заведующий кафедрой  prof. С.М. Аракелян

(ФИО, подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 28.03.01

Протокол № 11 от 07.04.15 года

Председатель комиссии  prof. С.М. Аракелян

(ФИО, подпись)

### **ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Рабочая программа одобрена на \_\_\_\_\_ учебный год

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ года

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_