

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Костромской государственный университет»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**ПРАКТИКУМ ПО КОМПЬЮТЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ В
ФИЗИКЕ**

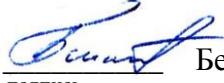
Направление подготовки 03.03.02–Физика

Направленность: Физика

Квалификация (степень) выпускника: Бакалавр

Кострома

Рабочая программа дисциплины «Практикум по компьютерному моделированию в физике» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования направления подготовки 03.03.02–Физика, утвержден 07.08.2014 г.

Разработал: 
подпись Белихов Александр Борисович, доцент кафедры общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

Рецензент: 
подпись Дьяков Илья Геннадьевич, доцент кафедры общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

УТВЕРЖДЕНО:

На заседании кафедры общей и теоретической физики
Протокол заседания кафедры № 15 от 29 июня 2017 г.
Заведующий кафедрой общей и теоретической физики


подпись Шадрин Сергей Юрьевич, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

ПЕРЕУТВЕРЖДЕНО:

На заседании кафедры общей и теоретической физики
Протокол заседания кафедры № 12 от 28 июня 2018 г.
Заведующий кафедрой общей и теоретической физики


подпись Шадрин Сергей Юрьевич, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

ПЕРЕУТВЕРЖДЕНО:

На заседании кафедры общей и теоретической физики
Протокол заседания кафедры № 10 от 20 мая 2019 г.
Заведующий кафедрой общей и теоретической физики


подпись Шадрин Сергей Юрьевич, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

ПЕРЕУТВЕРЖДЕНО:

На заседании кафедры общей и теоретической физики
Протокол заседания кафедры № 10 от 7 мая 2020 г.
Заведующий кафедрой общей и теоретической физики


подпись Шадрин Сергей Юрьевич, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, к.т.н., доцент

ПЕРЕУТВЕРЖДЕНО:

На заседании кафедры общей и теоретической физики

Протокол заседания кафедры № 5 от 14 января 2021 г.

Заведующий кафедрой общей и теоретической физики



подпись

Шадрин Сергей Юрьевич, заведующий кафедрой общей и

теоретической физики, к.т.н., доцент

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Основной целью курса является подготовка бакалавров физики к научно-исследовательской, научно-инновационной, организационно-управленческой деятельности в научно-исследовательских институтах, лабораториях, конструкторских или проектных бюро, на предприятиях путем формирования соответствующих компетенций.

В результате изучения учебной дисциплины «Практикум по компьютерному моделированию в физике» обучаемые должны приобрести общепрофессиональную компетенцию:

– способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-5)

и профессиональную компетенцию

– способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2).

Задачи дисциплины:

– на базе термодинамического описания ввести основные понятия и выявить взаимосвязи, основанные на наиболее общих законах природы;

– на базе математических методов и моделей макроскопических сред развить статистический метод исследования;

– провести термодинамическое соответствие результатов, полученных статистическими методами;

– изучить методы описания неравновесных систем, дать представление об основах кинематики процессов выравнивания и структурных явлениях в потоках.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать

– основы фундаментальных разделов общей и теоретической физики, в частности, иметь устойчивое знание основных законов и методов термодинамики, квазистатических и нестатических процессов, условий равновесия и устойчивости, теории фазовых переходов, основных представлений статистической механики, распределений Гиббса, теории идеальных бозе- и ферми газов, теории флуктуаций, броуновского движения и случайных процессов, основ термодинамической теории необратимых процессов, кинетических уравнений статистической физики, необходимых для адекватного теоретического описания физических систем;

уметь

– использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики, в частности, интерпретировать формальные записи имеющихся математических объектов для задания физических моделей природных явлений, выделять в этих моделях физическое содержание и границы применимости;

владеть

– методами и приемами интерпретации полученных результатов с учетом границ применимости моделей, в частности методами работы с термодинамическими системами и статистическими ансамблями, необходимыми для описания рассматриваемых термодинамических процессов и физических явлений.

ОСВОИТЬ КОМПЕТЕНЦИИ:

- способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией (ОПК-5)
- способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2).

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Дисциплина «Практикум по компьютерному моделированию в физике» изучается в седьмом семестре и входит в часть дисциплин по выбору Блока Б1.В.ДВ.9 образовательной программы подготовки бакалавров физики.

К вопросам, составляющим основное содержание курса, относятся: Основы теории алгоритмов, наиболее удобного для решения задач по физике за счёт многочисленных встроенных функций и обилием общедоступных библиотек прикладных программ, визуализация данных с помощью свободного программного обеспечения, решения стандартных задач прикладной физики в специализированных программных комплексах (например, Elmer Solver), основам программирования параллельных вычислений.

Изучаемый материал подобран в соответствии с особенностями основной образовательной программы бакалавров физиков и имеет большую практическую направленность, основная часть практических приложений подобрана с расчетом на другие дисциплины курса теоретической физики.

Перед изучением дисциплины «Практикум по компьютерному моделированию в физике» обучающийся должен иметь представления об основах программирования, об особенностях операций со скалярными, векторными и тензорными величинами, операциях с матрицами, дифференциальном и интегральном исчислении. Требуемые компетенции формируются в рамках дисциплин «Информационные технологии», «Вычислительная физика», «Векторный и тензорный анализ».

Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для курсов по выбору «Физика поверхности» и «Основы теплопроводности твердых тел». Формирование общепрофессиональной компетенции ОПК-6 и профессиональной компетенции ПК-2 будет продолжено при выполнении выпускной квалификационной работы и итоговой аттестации.

4. Объем дисциплины (модуля)**4.1. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием академических (астрономических) часов и виды учебной работы**

Виды учебной работы,	Очная форма
Общая трудоемкость в зачетных единицах	3
Общая трудоемкость в часах	108
Аудиторные занятия в часах, в том числе:	28
Лекции	–
Практические занятия	28
Лабораторные занятия	–
Самостоятельная работа в часах	80
Контроль	
Форма промежуточной аттестации	Зачет 7 семестр

4.2. Объем контактной работы на 1 обучающегося

Виды учебных занятий	Очная форма
Лекции	–
Практические занятия	28
Лабораторные занятия	–
Консультации	–
Зачет/зачеты	0,25
Экзамен/экзамены	–
Курсовые работы	–
Курсовые проекты	–
Всего	28,25

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием количества часов и видов занятий

5.1 Тематический план учебной дисциплины

№	Название раздела, темы	Всего з.е/час	Аудиторные занятия			Самостоятельная работа
			Лекц.	Практ.	Лаб.	
1	Основы теории алгоритмов	22		6		16
2	Визуализация данных	24		6		18
3	Современные пакеты компьютерной математики	24		8		16
4	Высокопроизводительные вычисления с использованием параллельных вычислений	26		8		18
5	Зачет	12				12
	Итого:	108		28		80

5.2. Содержание:

Тема 1. Основы теории алгоритмов.

Обработка массивов и матриц. Условные операторы IF ... THEN ... ELSE ... END IF. Оператор цикла со счетчиком. Оператор цикла с предусловием. Подпрограммы и модули в FORTRAN. Рекурсивные процедуры и функции. Смешанное программирование на языках С и FORTRAN. Компилятор GNU FORTRAN. Компилятор Intel FORTRAN. Компиляция многомодульных программ. Использование математических библиотек LAPACK и BLAS.

Тема 2. Визуализация данных.

Построение двумерных и трехмерных графиков. Программа GnuPlot. Визуализация кристаллических и молекулярных структур. Отображение изоповерхностей и контуров с

наложением на структуру. Программа XCrySDen. Визуализация векторных полей. Построение линий тока, траекторий частиц. Программа ParaView.

Тема 3. Современные пакеты компьютерной математики.

Метод конечных элементов. Стационарное и нестационарное течение. Сжимаемая и несжимаемая жидкость. Несмешиваемые жидкости. Нагрев воды. Неустановившийся поток. Турбулентное течение. Решение задач тепломассопереноса. Распределение температуры. Тепловое излучение. Термодиффузия. Теплоперенос между различными средами. Парные потенциалы взаимодействия. Краевые условия. Вычисление макроскопических величин. Свойства переноса. Структурная оптимизация. Релаксация поверхности. Поиск низкоэнергетических форм атомных кластеров. Задача механики деформируемого твёрдого тела. Расчет полей напряжения. Колебательные моды. Температурная деформация.

Тема 4. Основы параллельных вычислений.

Основные концепции архитектуры высокопроизводительных вычислительных систем. Характеристики вычислительных кластеров. Подключение к кластеру. Типы соединений. Работа с файлами. Командные оболочки. Скрипты запуска параллельных программ. Система очередей. Технологии распараллеливания: MPI и OpenMP. Распределенные вычисления с использованием языка программирования в FORTRAN.

6. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Курс «Практикум по компьютерному моделированию в физике» предназначен для студентов института физико-математических и естественных наук направления подготовки «Физика». Для усвоения излагаемого материала от слушателей требуется умение дифференцировать, интегрировать и знание основных положений курса молекулярной физики.

В данном курсе представлены необходимые сведения по термодинамике, статистической физике и элементам физической кинетики. По окончании курса студент должен иметь устойчивое знание основных законов и методов термодинамики, квазистатических и нестатических процессов, условий равновесия и устойчивости, теории фазовых переходов, основных представлений статистической механики, канонических распределений Гиббса, теории идеальных бозе- и ферми газов, теории флуктуаций, броуновского движения и случайных процессов, основ термодинамической теории необратимых процессов, кинетических уравнений статистической физики. По завершении курса «Практикум по компьютерному моделированию в физике», студент должен уметь на этой основе проводить необходимые расчеты физических характеристик систем и давать им физическую интерпретацию.

Курс снабжен необходимым количеством прикладных задач прикладного физического характера, способствующих лучшему усвоению понятий и методов термодинамики, статистической физики и физической кинетики. Термодинамика – это одна из основополагающих дисциплин цикла подготовки. В курсе рассматриваются также элементы теории вероятностей и статистической физики – математический аппарат, с помощью которого не только сокращаются многосистемные выкладки, но и концентрируется физическая идея, так как использование теории вероятностей и статистической физики позволяет отодвинуть на второй план сложную целостную картину физического явления.

Цель данного курса состоит в становлении профессионального уровня подготовки бакалавра, обеспечение необходимыми знаниями и развитие практических навыков работы с положениями и выводами классической и прикладной термодинамики, с основными математическими объектами термодинамических систем, теории вероятностей

и статистической физики.

Задачами изучения курса являются: закрепить и развить знания, умения и приемы, полученные при усвоении курсов, на которые опирается данная дисциплина. В частности, на базе термодинамического описания ввести основные понятия и выявить взаимосвязи, основанные на наиболее общих законах природы. На базе математических методов и моделей макроскопических сред, развить статистический метод исследования, провести термодинамическое соответствие результатов, полученных статистическими методами. Изучить методы описания неравновесных систем, дать представление об основах кинематики процессов выравнивания и структурных явлениях в потоках.; подготовить исходный уровень знаний и навыков, необходимых для успешного выполнения выпускной квалификационной работы, прохождения итоговой аттестации, дальнейшего обучения в магистратуре и т.д.

6.1. Самостоятельная работа обучающихся по дисциплине (модулю)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Задание	Часы	Методические рекомендации по выполнению задания	Форма контроля
1	Основы теории алгоритмов	Индивидуальные задания из списка, приведенного ниже	16	Использовать материалы семинаров и источники [1], [4] из списка основной литературы	Тест, контрольные работы, опрос
2	Визуализация данных	Индивидуальные задания из списка, приведенного ниже	18	Использовать материалы семинаров и источники [1–3] из списка основной литературы и [1] из списка дополнительной литературы	Тест, контрольные работы, опрос
3	Современные пакеты компьютерной математики	Индивидуальные задания из списка, приведенного ниже	16	Использовать материалы семинаров и источники [1–3] из списка основной литературы	Тест, контрольные работы, опрос
4	Высокопроизводительные вычисления с использованием параллельных вычислений	Индивидуальные задания из списка, приведенного ниже	18	Использовать материалы семинаров и источники [2], [5] из списка основной литературы	Тест, контрольные работы, опрос
5	Зачет	Задания для зачета	12	Использовать материалы семинаров и источники [2], [5] из списка основной литературы	Зачет

6.2. Тематика и задания для практических занятий

Ниже приведены примерные планы практических занятий. Номера задач даны по учебному пособию Ефремов, Ю. С. Статистическая физика и термодинамика : учебное пособие. – М.–Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 208 с. ISBN 978-5-4475-4620-5.

Семинары 1–2.

Тема: Основы теории алгоритмов

Задачи для разбора с преподавателем: 1 –.5 (стр. 38 – 41 из [2]).

Задачи для самостоятельной работы: 1 –.10 (стр. 41 – 42 из [2]).

Обсуждаемые вопросы: Распределенные вычисления с использованием языка программирования в FORTRAN. Обработка массивов и матриц с помощью средств FORTRAN. Условные операторы в FORTRAN. Оператор цикла со счетчиком в FORTRAN. Оператор цикла с предусловием в FORTRAN. Подпрограммы и модули в FORTRAN. Рекурсивные процедуры и функции в FORTRAN. Смешанное программирование на языках С и FORTRAN. Компилятор GNU FORTRAN. Компилятор Intel FORTRAN.

Семинары 3–4.

Тема: Визуализация данных

Задачи для разбора с преподавателем: 1 –.5 (стр. 60 – 63 из [2]).

Задачи для самостоятельной работы: 1 –.10 (стр. 63 – 64 из [2]).

Обсуждаемые вопросы: Удаленный доступ. SSH и WinSCP соединение. Использование файлового менеджера Midnight Commander. Пакетный режим. Система очередей. Параметры для команды qsub. Язык сценариев командной оболочки. Скрипты запуска задач. Проверка состояния и параметров исполняемой задачи. Остановка исполнения задачи. Концепции и технологии распараллеливания. Принципы декомпозиции. Построение двумерных и трехмерных графиков с помощью программы GnuPlot. Визуализация кристаллических и молекулярных структур. Отображение изоповерхностей и контуров с наложением на структуру. Программа ParaView. Визуализация векторных полей. Построение линий тока, траекторий частиц.

Семинары 5–6.

Тема: Современные пакеты компьютерной математики

Задачи для разбора с преподавателем: 1 –.5 (стр. 73 – 77 из [2]).

Задачи для самостоятельной работы: 1 –.10 (стр. 77 – 78 из [2]).

Обсуждаемые вопросы: Изучение электронной структуры материалов. Вычисление макроскопических величин. Свойства переноса. Метод конечных элементов. Особенности реализации. Пре-процессинг и пост-процессинг в пакете Elmer FEM Solver. Решение уравнений Навье-Стокса для сжимаемых и несжимаемых жидкостей в пакете Elmer FEM Solver.

Семинары 7–8.

Тема: Высокопроизводительные вычисления с использованием параллельных вычислений

Задачи для разбора с преподавателем: 1 –.5 (стр. 116 – 124 из [2]).

Задачи для самостоятельной работы: 1 –.10 (стр. 124 – 125 из [2]).

Обсуждаемые вопросы: Исследование неустойчивости Кельвина – Гельмгольца с помощью пакета Elmer FEM Solver. Изучение задач теплопроводности в пакете Elmer FEM Solver. Изучение теплового излучения в пакете Elmer FEM Solver. Изучение термодиффузии и теплопереноса в пакете Elmer FEM Solver. Расчет полей напряжения в пакете Elmer FEM Solver. Колебательные моды в пакете Elmer FEM Solver. Температурная деформация в пакете Elmer FEM Solver.

7. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

а) основная

1. Бартенев О.В. Фортран для студентов: учебное пособие. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2001. – 448 с. ISBN:5-86404-120-3 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=54749
2. Топорков В. В. Модели распределенных вычислений. – М.: Физматлит, 2011. – 448 с. ISBN: 5-9221-0495-0 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=75957
3. Николаев Е. И. Параллельные вычисления: учебное пособие. – Ставрополь: СКФУ, 2016. – 185 с. https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=459124
4. Бартенев О.В. Современный Фортране. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2005. – 445 с. ISBN: 5-86404-113-0 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89273
5. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии MPI. – М.: Интернет-Университет Информационных Технологий, 2008. – 71 с https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=233577

б) дополнительная

1. Кузнецов А. С. , Царев Р. Ю. , Князьков А. Н. Теория вычислительных процессов: учебник. – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2015. – 184 с. ISBN: 978-5-7638-3193-1 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=435696
2. Бартенев О.В. Фортран для профессионалов : математическая библиотека IMSL : в 3 ч., Ч. 1 – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2001. – 448 с. ISBN: 5-86404-152-1 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89375
3. Бартенев О.В. Фортран для профессионалов : математическая библиотека IMSL : в 3 ч., Ч. 2 – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2001. – 316 с. ISBN: 5-86404-157-2 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89376
4. Бартенев О.В. Фортран для профессионалов. Математическая библиотека IMSL. В 3-х ч. Ч. 3. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2001. – 368 с. ISBN 5-86404-158-0 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89377
5. Бартенев О.В. Графика OpenGL : программирование на Фортране: пособие. М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2000. – 368 с. ISBN 5-86404-137-8 https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=89296

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Информационно-образовательные ресурсы:

1. Общероссийский математический портал Math-Net.Ru.
Электронные библиотечные системы:
1. Университетская библиотека онлайн <http://biblioclub.ru>
2. «Лань» <http://e.lanbook.com/>
3. ЭБС «Znanium»

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

Аудитория для лекций:

Корпус Е, № 209, количество посадочных мест – 30, мультимедийный комплекс, включающий экран, ноутбук и проектор.

Аудитория для практических занятий:

Корпус Е, № 212, количество посадочных мест – 24.

Аудитории для самостоятельной работы:

Читальный зал корпуса «Е», количество посадочных мест – 22, 9 компьютеров (6 для читателей, 3 для сотрудников); 1 сканер.

Читальный зал корпуса «Б1», количество посадочных мест – 200. 3 компьютера для сотрудников; 1 принтер; 1 копир/принтер; 1 проектор; 2 экрана для проектора; 1 ворота «Антивор»; 1 WIFI-точка доступа. Лицензионное ПО: АИБС МаркSQL.

Компьютерный класс, корпус "Е", ауд.227, количество посадочных мест – 16, Блок

системный КМ Office ТЗ-4170, монитор Philips. Лицензионное ПО: Windows 8.1 Pro
договор № 50155/ЯР4393 от 12.12.2014 с ООО Софт-лайн Проекты, MathCAD Education
договор № 208/13 от 10.06.2013 с ООО ЮнитАльфаСофт.