

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«14» июня 2015 г..

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Численные методы в науке о полимерах

Уровень высшего образования:

Подготовка кадров высшей квалификации

Направление подготовки (специальность):

04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) ОПОП:

Высокомолекулярные соединения

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №4 от 03 июня 2015 г.)

Москва 2015

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» на основе Образовательного стандарта, самостоятельно установленного МГУ имени М.В.Ломоносова (далее – ОС МГУ), утвержденного Приказом № 552 от 23.06.2014 г. по МГУ с учетом изменений в ОС МГУ, внесенных Приказом №831 по МГУ от 31.08.2015 г..

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018,
2018/2019, 2019/ 2020

1. Краткая аннотация: основная задача курса – познакомить слушателей с численными методами, используемыми в современной науке о полимерах

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. Направление подготовки 04.06.01 Химические науки. Направленность программы Высокомолекулярные соединения.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Вариативная часть ООП, Дисциплина по выбору аспиранта (время освоения определяется индивидуальным планом аспиранта, в течение 2, 3 или 4 семестра, 1 или 2 года обучения).

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1 Способностью анализировать взаимосвязь молекулярной и надмолекулярной структуры и физико-химическими свойствами полимеров	Знать современное состояние науки в области химии, физики и механики высокомолекулярных соединений Знать теоретические модели высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численные методы решения соответствующих задач Уметь: использовать структурную информацию и другие характеристики полимерных систем для моделирования их свойств

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 70 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов - занятия лекционного типа, 14 часов индивидуальные консультации, 18 часов мероприятия текущего контроля успеваемости, 2 часа мероприятия промежуточной аттестации), 38 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (если есть).

Должны быть успешно освоены дисциплины базовой части учебного плана

8. Образовательные технологии (отметить если применяется электронное обучение и дистанционные технологии).
Используются следующие технологии: лекции-демонстрации и интерактивные лекции. Преподавание дисциплины проводится в форме авторских курсов по программам, которые составлены на основе результатов исследований, полученных научными школами МГУ.

9. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.)	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1.	10	4			2	2	8		2	2
Тема 2.	28	12			4	6	22		6	6
Тема 3.	28	12			4	6	22		6	6

Тема 4.	18	8			4	4	16		2	2
Промежуточная аттестация зачёт	24						2		20	22
Итого	108	36			14	18	70		30	38

Содержание тем:

Тема 1. Использование компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика.

Тема 2. Методы анализа экспериментальных данных.

Тема 3. Численные методы решения некоторых математических задач, встречающихся в работе химика-экспериментатора.

Тема 4. Основы компьютерного моделирования полимерных систем

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

1. Пытьев Ю. П., Шишмарев И. А. Курс теории вероятностей и математической статистики для физиков : Учеб. пособие. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983. — 256 с.
2. Колмогоров А. Н., Журбенко И. Г., Прохоров А. В. Введение в теорию вероятностей : - М., Наука, 1982. - 160 с. - Библ-ка "Квант". Выпуск 23
3. Булинский А. В., Ширяев А. Н. Теория случайных процессов : - М., ФИЗМАТЛИТ, 2005. - 408 с.
4. Худсон Д. Статистика для физиков, лекции по теории вероятностей и элементарной статистике: - М., МИР, 1970. – 295 с.
5. Ширванянц Д.Г., Халатур П.Г. Компьютерное моделирование полимеров : - Учеб. пособие. – Тверь : Твер. гос. ун-т, 2000. – 156 с.
6. Kremer K., Grest G.S. Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulation in Polymer Science: Ed. K. Binder New York : Oxford University Press, 1995. P. 194.

Периодическая литература

Журнал «Высокомолекулярные соединения»

Интернет-ресурсы

1. vmsmsu.ru

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

Поддерживается сайт с методическими материалами к курсу в сети Интернет www.vmsmsu.ru

- Описание материально-технической базы.

Занятия проводятся в специально оборудованных аудиториях (ауд. 501, ауд. 619 лабораторного корпуса А). Аудитории снабжены средствами мультимедиа презентаций и доступом в сеть Интернет.

12. Язык преподавания - русский

13. Преподаватель (преподаватели).

Доцент, кандидат химических наук Королёв Борис Александрович

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения приведены в п.5.
2. Материалы к текущей (контрольные работы, вопросы к коллоквиумам и пр.), промежуточной аттестации (вопросы к зачету)

Список контрольных вопросов

1. Основные направления использования компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика. Классификация этапов развития функциональных возможностей компьютеров.
2. Анализ результатов эксперимента. Проверка теоретических значений и зависимостей. Учет ошибок измерений.
3. Экспериментальные ошибки, причины их возникновения. Классификации ошибок измерения по их свойствам и способам представления. Способы учета и уменьшения ошибок. Теоретический предел точности измерения.
4. Случайная ошибка как случайная величина. Функция плотности вероятности и ее основные свойства. Функция плотности вероятности случайной ошибки.
5. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, способы их определения. Связь математического ожидания и дисперсии с измеряемым значением и его ошибкой. Прямая и обратная задача.

6. Метод наименьших квадратов (МНК), его принцип и обоснование. Линейные и нелинейные задачи. Линеаризация. Взвешенный метод наименьших квадратов (ВМНК). Использование ВМНК при анализе разнородных по точности данных. Проверка гипотез.
7. Численные методы решения некоторых вычислительных задач. Решение нелинейных уравнений и систем уравнений. Численное интегрирование и дифференцирование. Сплайн-сглаживание.
8. Численные эксперименты и компьютерное моделирование, их понятие и основные принципы. Усреднение по времени и по ансамблю. Методы молекулярной динамики и Монте-Карло.
9. Основные требования, предъявляемые к компьютерным моделям. Решеточные и континуальные модели. Периодические граничные условия. Способы создания начальных конфигураций и их дальнейшая модификация.

Примеры ПКЗ.

1. В таблице приведены результаты измерения величины Y при различных значениях величины X :

X	2	4	5	7
Y	-11	-10	2	29

Предполагается, что рассматриваемые величины связаны следующим соотношением:

$$y(x) = x \cdot (a \cdot x + b)$$

Определите значения параметров a и b , при которых указанная функция наилучшим образом описывает наблюдаемые экспериментальные данные.

2. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$x^3 + x = 3$$

3. В таблице приведены результаты измерения величины Y при различных значениях величины X :

X	1	2	4	5
Y	3	8	12	16

Предполагается, что рассматриваемые величины связаны следующим соотношением:

$$y(x) = a \cdot x$$

Определите значения параметров a и b , при которых указанная функция наилучшим образом описывает наблюдаемые экспериментальные данные.

4. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$e^x = 2 - x$$

5. Известно значение трех величин a, b и c :

$$a = 2,3 \pm 0,1$$

$$b = 4,0 \pm 0,2$$

$$c = 1,52$$

Относительная погрешность величины c равна 5%.

Найдите значение $y = a \cdot b + c^2$ и оцените точность результата.

6. Найдите корень уравнения с точностью до 0,1 :

$$e^x = x^2$$

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Оценивание результатов обучения (текущий контроль успеваемости) ведётся по пятибалльной шкале или системе «зачёт-незачёт». Успешным прохождением контрольного мероприятия считается получение отметки «зачёт» или балла, не меньшего 3. Промежуточная аттестация в форме зачёта считается пройденной при успешном прохождении 80% мероприятий текущего контроля успеваемости. В ином случае обучающийся должен успешно продемонстрировать степень овладения знаниями, умениями и навыками в ходе ответа на вопросы зачёта и решения контрольных задач.

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие	В целом успешное, но не	В целом успешное, но содержащее	Успешное и систематическое

	умений	систематическое умение	отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач