

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины

1. Код и наименование дисциплины **Численные методы в 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) |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>УК-1</i> способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | <i>B1 (УК-1)</i> Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях |
| <i>УК-2</i> способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки | <i>З1 (УК-2)</i> Знать методы научно-исследовательской деятельности |
| <i>ПК-6</i> способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию | <i>З1 (ПК-6)</i> Знать современное состояние науки в области химии, физики и механики высокомолекулярных соединений |
| | <i>З3 (ПК-6)</i> Знать теоретические модели высокомолекуляр- |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.06 Высокомолекулярные соединения | ных соединений и систем, их содержащих, а также численные методы решения соответствующих задач |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

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 единиц, всего 108 часов, из которых 78 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов - занятия лекционного типа, 18 часов групповые консультации, 18 часов мероприятия текущего контроля успеваемости, 6 мероприятия промежуточной аттестации), 30 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. Использование компьютерной техники в профессиональной деятельности научного сотрудника-химика. | 8 | 4 | 0 | 2 | 0 | 2 | 8 | 0 | 0 | 0 |
| Тема 2. Методы анализа экспериментальных данных. | 24 | 12 | 0 | 6 | 0 | 6 | 24 | 0 | 0 | 0 |
| Тема 3. Численные методы решения некоторых математиче- | 24 | 12 | 0 | 6 | 0 | 6 | 24 | 0 | 0 | 0 |

| | | | | | | | | | | |
|--------------------------------------------------------------|------------|----|---|----|---|----|-----------|----|---|-----------|
| ских задач, встречающихся в работе химика-экспериментатора. | | | | | | | | | | |
| Тема 4. Основы компьютерного моделирования полимерных систем | 16 | 8 | 0 | 4 | 0 | 4 | 16 | 0 | 0 | 0 |
| Промежуточная аттестация зачёт | 36 | | 6 | | | | | 30 | | |
| Итого | 108 | 36 | 0 | 18 | 0 | 18 | 78 | 0 | 0 | 30 |

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 для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
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.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Численные методы в науке о полимерах» на основе карт компетенций выпускников

| РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) | КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) <i>(критерии и показатели берутся из соответствующих карт компетенций, при этом используются либо традиционной системой оценивания, либо БРС)</i> | | | | | ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| <i>В1 (УК-1) Владеть</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | Отсутствие навыков | Фрагментарное применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач | В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач | В целом успешное, но содержащее отдельные проблемы применения навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач | Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | ПКЗ на предмет установления последовательности действий при решении поставленной задачи с учетом знаний и навыков, полученных в курсе |
| <i>З1 (УК-2) Знать</i> методы научной исследовательской деятельности | Отсутствие знаний | Фрагментарные представления о методах научной исследовательской деятельности | Неполные представления о методах научной исследовательской деятельности | Сформированные, но содержащие отдельные проблемы представления о методах научной исследовательской деятельности | Сформированные систематические представления о методах научной исследовательской деятельности | Индивидуальное собеседование-устный опрос |

| | | | | | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|
| <p>31(ПК-6) Знать современное состояние науки в области химии, физики и механики ВМС</p> | <p>Отсутствие знаний</p> | <p>Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области химии, физики и механики ВМС</p> | <p>Неполные представления о современном состоянии науки в области химии, физики и механики ВМС</p> | <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современном состоянии науки в области химии, физики и механики ВМС</p> | <p>Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области химии, физики и механики ВМС</p> | <p>Индивидуальное собеседование – устный опрос</p> |
| <p>33 (ПК-6) Знать теоретические модели высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численные методы решения соответствующих задач</p> | <p>Отсутствие знаний</p> | <p>Фрагментарные представления о теоретических моделях высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численных методах решения соответствующих задач</p> | <p>Неполные представления о теоретических моделях высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численных методах решения соответствующих задач</p> | <p>Сформированные: но содержащие отдельные пробелы о теоретических моделях высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численных методах решения соответствующих задач</p> | <p>Сформированные систематические представления о теоретических моделях высокомолекулярных соединений и систем, их содержащих, а также численных методах решения соответствующих задач</p> | <p>Индивидуальное собеседование – устный опрос</p> |