

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
природоподобных, плазменных и  
ядерных технологий им. И.В.  
Курчатова**

**Т.Е. Григорьев**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

<b>по дисциплине:</b>	Физико-химическое моделирование
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика атомных ядер и элементарных частиц, физика высоких энергий Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра физики и химии плазмы
<b>курс:</b>	4
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составил: А.С. Петрусов, канд. физ.-мат. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики и химии плазмы 27.03.2025

## **Аннотация**

Курс: "Физико-химическое моделирование" предусматривает освоение студентами фундаментальных знаний в области методов численного моделирования, а также областей их практического применения.

Задачи курса:

- формирование и расширение базовых знаний в области численных методов, как дисциплины, объединяющей общетеоретическую и практическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов основным подходам к компьютерной обработке данных, а также численному решению уравнений, встречающихся в задачах физики плазмы, связанным как с математическими свойствами этих уравнений, так и с особенностями современной вычислительной базы;
- формирование навыков применения численного моделирования, создания новых алгоритмов и компьютерных программ применительно к выполнению исследований студентами как в рамках выпускных работ на степень бакалавра, так и в научно-исследовательских и прикладных целях.

По результатам освоения курса студент должен:

Знать:

основы одного или нескольких алгоритмических языков, общие характеристики языков программирования и этапы разработки программ; основы работы с пакетами прикладных программ в области математики и физики

Уметь:

выбирать оптимальные алгоритмы для современных программ;  
разрабатывать полные законченные программы на одном из языков высокого уровня;  
писать многомодульные программы на одном или нескольких современных языках программирования, как индивидуально, так и в команде;  
использовать современные средства для написания и отладки программ;  
использовать знания по информатике для приложений в физике и других естественных, гуманитарных и социально-экономических науках, в инновационной и конструкторско-технологической и производственно-технологической сферах деятельности.

Владеть:

одним или несколькими современными языками программирования и средствами создания программ с использованием библиотек

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Основные методы исследования конечно-разностных схем. Обзор разностных схем для модельных уравнений
2. Основные методы расщепления. Итерационное решение сеточных уравнений
3. Схемы на неоднородных сетках. Построение адаптивных сеток
4. Численное решение уравнений динамики сплошной среды

## **1. Цели и задачи**

### **Цель дисциплины**

- освоение студентами фундаментальных знаний в области методов численного моделирования, а также областей их практического применения.

### **Задачи дисциплины**

- формирование и расширение базовых знаний в области численных методов, как дисциплины, объединяющей общетеоретическую и практическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов основным подходам к компьютерной обработке данных, а также численному решению уравнений, встречающихся в задачах физики плазмы, связанным как с математическими свойствами этих уравнений, так и с особенностями современной вычислительной базы;
- формирование навыков применения численного моделирования, создания новых алгоритмов и компьютерных программ применительно к выполнению исследований студентами как в рамках выпускных работ на степень бакалавра, так и в научно-исследовательских и прикладных целях.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-3 Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	УК-3.1 Способен устанавливать разные виды коммуникации (учебную, научную, деловую, неформальную и др.)
	УК-3.2 Взаимодействует с другими членами команды для достижения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
	ПК-2.3 Способен представлять научные утверждения, их обоснования и доказательства, научные проблемы и их решения ясно и точно в терминах, понятных для профессиональной аудитории, в письменной и устной форме

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основы одного или нескольких алгоритмических языков, общие характеристики языков программирования и этапы разработки программ;
- основы работы с пакетами прикладных программ в области математики и физики.

уметь:

- выбирать оптимальные алгоритмы для современных программ;
- разрабатывать полные законченные программы на одном из языков высокого уровня;
- писать многомодульные программы на одном или нескольких современных языках программирования, как индивидуально, так и в команде;
- использовать современные средства для написания и отладки программ;
- использовать знания по информатике для приложений в физике и других естественных, гуманитарных и социально-экономических науках, в инновационной и конструкторско-технологической и производственно-технологической сферах деятельности.

владеть:

- одним или несколькими современными языками программирования и средствами создания программ с использованием библиотек.

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Основные методы исследования конечно-разностных схем. Обзор разностных схем для модельных уравнений.	7			3
2	Основные методы расщепления. Итерационное решение сеточных уравнений.	8			4
3	Схемы на неоднородных сетках. Построение адаптивных сеток.	7			4
4	Численное решение уравнений динамики сплошной среды.	8			4
Итого часов		30			15
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		45 час., 1 зач.ед.			

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Основные методы исследования конечно-разностных схем. Обзор разностных схем для модельных уравнений.

Необходимость дискретизации дифференциальной задачи, её основные аспекты и способы.

Дискретизация функции, основные способы и ограничения, аппроксимация на сетку и разложение по базису.

Дискретизация дифференциального уравнения: невязка дифференциального оператора, замена дифференциала конечной разностью.

Методы Монте-Карло для эволюционных задач матфизики: замена задачи Коши на марковский процесс.

Связь разных подходов друг с другом, их достоинства и недостатки, возможные области применения.

Основные свойства разностных схем: аппроксимация, устойчивость и сходимость.

Локальная и глобальная погрешность, их исследование.

Устойчивость, как глобальное свойство разностной задачи: (равномерно) непрерывная зависимость решения от параметров.

Виды устойчивости, устойчивость по правой части, начальным и краевым условиям. Условная и безусловная временная устойчивость.

Спектральный и энергетический подходы к исследованию устойчивости, устойчивость по Нейману, аналогии с устойчивостью дифференциальных задач, аналог теоремы Ляпунова.

Сходимость решения разностной задачи к решению дифференциальной, ряд Неймана, теорема Филиппова - Рябенского.

Обзор распространённых конечно-разностных схем для модельных уравнений. Их аппроксимация и устойчивость. Явные и неявные схемы, понятие экономичности, методы реализации одномерных неявных линейных схем, схема бегущего счёта, виды прогонок.

Методы повышения точности конечно-разностных схем; правило Рунге, схемы Кранка-Николсона, Лакса-Вендроффа, Петухова, Толстых.

Ограниченность понятия аппроксимации при работе с негладкими решениями: осцилляции и ложная сходимость.

Использование аддитивных законов сохранения для построения разностных схем; консервативные схемы.

Понятие о монотонности и положительной аппроксимации схемы по Фридрихсу. Критерии монотонности для явных и неявных линейных схем с постоянными коэффициентами, исследование монотонности разностных схем для модельных уравнений.

Монотонность схем для уравнения переноса, теорема Годунова; сеточно-характеристические методы, их достоинства и недостатки. Метод Годунова для одномерных уравнений газовой динамики. Гибридные схемы и их развитие: схема Федоренко, метод коррекции потоков (FCT). Понятие о полной вариации решения, метод TVD. Понятие о схемах точного воспроизведения, метод прыжкового переноса.

## 2. Основные методы расщепления. Итерационное решение сеточных уравнений.

Проблема экономичности для многомерных конечно-разностных задач и аддитивное разложение (расщепление) разностного оператора. Основные способы расщепления оператора: расщепление по направлениям (Письман и Рэчфорд), расщепление по процессам (Яненко и Ковеня), попеременно - треугольное расщепление (Самарский, Ильин), пространственное расщепление (декомпозиция области). Обеспечение положительности расщеплённых операторов.

Расщепление временного шага в эволюционных задачах, построение экономичных схем в дробных шагах на основе расщеплённых операторов, понятие о полной и суммарной аппроксимации.

Основные методы расщепления суммарной аппроксимации: простое покомпонентное расщепление (схема Дьяконова), аддитивно - усреднённое расщепление, двуциклическое покомпонентное расщепление (схема Марчука), расщепление типа предиктор - корректор.

Основные схемы расщепления полной аппроксимации: продольно-поперечная (схема Письмана - Рэчфорда), схема со стабилизирующей поправкой (Дугласа - Рэчфорда).

Понятие о схемах векторного расщепления (схемы Абрашина).

Схемы расщепления с несогласованным стабилизатором. Методы Булеева.

Использование схем расщепления для итерационного решения стационарных сеточных уравнений, причины существования оптимального временного шага, скорости сходимости для методов переменных направлений и попеременно - треугольного метода. Понятие о чебышевской оптимизации, оптимизация Золотарёва - Вашпресса.

Другие итерационные методы: метод последовательной релаксации и скорость его сходимости, методы наискорейшего спуска, минимальных поправок, минимальных невязок, сопряженных градиентов, понятие о многосеточном методе (методе Федоренко).

Основные подходы к реализации итерационных методов на многопроцессорных вычислительных комплексах, эффективность распараллеливания.

## 3. Схемы на неоднородных сетках. Построение адаптивных сеток.

Конечно - разностные схемы на неоднородных сетках, их устойчивость и аппроксимация, особенности их исследования. Дивергентный вид погрешности и порядок глобальной аппроксимации.

Глобальная погрешность и её минимизация. Проблема решений с резкими градиентами в узких областях; сетки, адаптированные к поведению решения; принцип равномерного распределения погрешности.

Построение сеток, адаптированных к поведению решения в случае одномерных конечно-разностных уравнений, решение задачи о распределении узлов.

Регулярные сетки, адаптированные к форме расчётной области. Конформные, квазиконформные и косоугольные преобразования координат. Запись конечно-разностных уравнений через коэффициенты Ламе и метод конечных объёмов.

Методы построения адаптивных сеток, принцип соответствия границ. Эллиптические, параболические и гиперболические генераторы сеток, их достоинства и недостатки. Возможность адаптации к поведению решения: способы сгущения координатных линий в областях типа погранслоя.

Эллиптический генератор ортогональных сеток для внутренней краевой задачи в двумерном случае, разворот косых углов, логарифмические особенности координатных линий, самопроизвольное сгущение и разрежение координатных линий.

Гиперболический генератор ортогональных сеток для внешней краевой задачи, пересечение координатных линий, необходимость сглаживания.

Понятие о нерегулярных сетках, использование методов конечных объёмов и конечных элементов. Проблема решения разностных уравнений на нерегулярных сетках.

Понятие о триангуляции Делоне в двумерном и трёхмерном случаях.

#### 4. Численное решение уравнений динамики сплошной среды.

Простейшие свойства уравнений однокомпонентной гидродинамики; течение несжимаемой жидкости; изотермическое течение сжимаемого газа, неадиабатическое течение идеального газа; сверхзвуковые течения, существенно дозвуковые течения.

Применяемые конечно-разностные схемы; метод переменных вихрь – функция тока, методы коррекции давления; постановка краевых условий. Реализация в одномерном и многомерном случаях; экономичность алгоритма; расщепление по процессам и по направлениям.

Уравнения многокомпонентной гидродинамики; транспортные свойства многокомпонентного газа, соотношения Стефана-Максвелла. Применяемые конечно-разностные методы; моделирование ламинарного горения.

Низкотемпературная плазма, как многокомпонентная жидкость; однотемпературное и многотемпературные приближения; проводимость многокомпонентного газа; численная модель дугового разряда в химически активном газе; двухтемпературная диффузионно-дрейфовая модель тлеющего разряда постоянного тока и особенности её численной реализации.

Уравнения Максвелла в квазистационарной форме и их численное решение; численные модели ВЧ и СВЧ разрядов в химически активном газе.

#### 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

#### 6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Фонд литературы кафедры

1. Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. - МГУ им. М.В. Ломоносова. - М.: БИНОМ, Лаб.знаний, 2006
2. Н. Н. Калиткин, Е. А. Альшина. Численные методы: в 2 кн.: Кн.1. Численный анализ. - (Университетский учебник. Прикладная математика и информатика). - М.: Академия, 2013.
3. Р. П. Федоренко Введение в численную физику. - Долгопрудный, Интеллект, 2008.

Дополнительная литература

Фонд литературы кафедры

1. Г. И. Марчук. Методы вычислительной математики. - 2-е изд. перераб. и доп. - М.: Наука, 1980

#### 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

**8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

не предусмотрены.

**9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика атомных ядер и элементарных частиц, физика высоких энергий Физтех-школа природоподобных, плазменных и ядерных технологий им. И.В. Курчатова кафедра физики и химии плазмы
<b>курс:</b>	<u>4</u>
<b>квалификация:</b>	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	А.С. Петрусов, канд. физ.-мат. наук, доцент



## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-3 Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	УК-3.1 Способен устанавливать разные виды коммуникации (учебную, научную, деловую, неформальную и др.)
	УК-3.2 Взаимодействует с другими членами команды для достижения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики
	ПК-1.2 Имеет глубокое знание и понимание базовых математических дисциплин
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
	ПК-2.3 Способен представлять научные утверждения, их обоснования и доказательства, научные проблемы и их решения ясно и точно в терминах, понятных для профессиональной аудитории, в письменной и устной форме

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Физико-химическое моделирование» обучающийся должен:

### знать:

- основы одного или нескольких алгоритмических языков, общие характеристики языков программирования и этапы разработки программ;
- основы работы с пакетами прикладных программ в области математики и физики.

### уметь:

- выбирать оптимальные алгоритмы для современных программ;
- разрабатывать полные законченные программы на одном из языков высокого уровня;
- писать многомодульные программы на одном или нескольких современных языках программирования, как индивидуально, так и в команде;
- использовать современные средства для написания и отладки программ;
- использовать знания по информатике для приложений в физике и других естественных, гуманитарных и социально-экономических науках, в инновационной и конструкторско-технологической и производственно-технологической сферах деятельности.

### владеть:

- одним или несколькими современными языками программирования и средствами создания программ с использованием библиотек.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы для дифференцированного зачета:

1. Основные подходы к численному решению задач математической физики. Преимущества и недостатки сеточного метода.
2. Основные свойства разностных схем: аппроксимация, устойчивость и сходимость. Локальная и глобальная погрешность, их исследование.
3. Устойчивость и её виды, методы исследования эволюционной устойчивости.
4. Обзор конечно-разностных схем для уравнения переноса.
5. Обзор конечно-разностных схем для уравнения теплопроводности.
6. Методы повышения точности конечно-разностных схем; правило Рунге, схемы Кранка-Николсона, Лакса-Вендроффа, Петухова, Толстых.
7. Реализация одномерного конечно-разностного метода. Схема бегущего счёта. Монотонная скалярная прогонка.
8. Использование аддитивных законов сохранения для построения разностных схем; консервативные схемы.
9. Понятие о монотонности и положительной аппроксимации схемы. Критерии монотонности для явных и неявных линейных схем с постоянными коэффициентами. Теорема Годунова.
10. Монотонизация конечно-разностных схем: сеточно-характеристические методы, схема Федоренко, метод коррекции потоков (FCT). Понятие о методе Годунова для одномерных уравнений газовой динамики.
11. Основные методы расщепления разностного оператора: расщепление по направлениям, расщепление по процессам, попеременно-треугольное расщепление.
12. Понятие о полной и суммарной аппроксимации. Схемы в дробных шагах суммарной аппроксимации.
13. Схемы в дробных шагах полной аппроксимации. Методы расщепления с несогласованным стабилизатором.
14. Основные итерационные методы решения сеточных уравнений. Понятие о многосеточном методе Федоренко.
15. Принцип равномерного распределения погрешности. Построение одномерных неоднородных сеток.
16. Построение сеток, адаптированных к форме расчётной области. Эллиптический генератор сеток для внутренней двумерной задачи.
17. Гиперболический генератор сеток для внешней двумерной задачи, его достоинства и недостатки.
18. Особенности существенно дозвуковых течений вязкого газа. Основные подходы к моделированию медленных течений. Особенности моделирования медленных течений с сильными изменениями плотности.
19. Уравнения многокомпонентной гидродинамики. Соотношения Стефана-Максвелла. Уравнения неразрывности компонентов и их численное решение. Основные трудности численного моделирования ламинарного горения.
20. Проводимость плазмы. Численная модель дугового разряда.
21. Уравнения Максвелла для плазмы в квазистационарном случае, их численное решение. Численные модели разрядов ВЧ и СВЧ.

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочётами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.