

Федеральное агентство по образованию
САРАТОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО

Кафедра радиофизики и
нелинейной динамики

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине **ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА**

для специальности 014200 – Биохимическая физика

реализуемой на физическом факультете

Саратов 2006 год

Рабочая программа
составлена в соответствии
с Государственным стандартом
высшего профессионального образования
по специальности 014200 – БИОХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА
(номер государственной регистрации 272 ен/сп от 27.03.2000 г.)

| | |
|--|---|
| <p style="text-align: center;">ОДОБРЕНО:</p> <p>Председатель учебно-методической комиссии физического факультета, профессор _____ В.Л.Дербов _____ 2006 г.</p> | <p style="text-align: center;">УТВЕРЖДАЮ:</p> <p>Проректор по учебной работе, профессор _____ Е.М. Первушов _____ 2006 г.</p> |
|--|---|

СОГЛАСОВАНО:

Декан физического факультета,
профессор _____

Д.А. Зимняков

Заведующий кафедрой радиофизики и
нелинейной динамики физического
факультета, профессор _____

В.С. Анищенко

| Вид учебной работы | Бюджет времени по формам обучения, час | | | | |
|----------------------------------|--|------------------|--------------|------------------|------------------|
| | Очная | | очно-заочная | заочная | |
| | полная программа | ускоренные сроки | | полная программа | ускоренные сроки |
| Аудиторные занятия, всего | 68 | - | - | - | - |
| в том числе: | | | | | |
| - лекции | 17 | - | - | - | - |
| - лабораторные (практические) | 51 | - | - | - | - |
| - семинарские | - | - | - | - | - |
| Самостоятельная работа студентов | 32 | - | - | - | - |
| Зачеты, +/- | + | - | - | - | - |
| Экзамены, +/- | - | - | - | - | - |
| Контрольные работы, количество | 1 | - | - | - | - |
| Курсовая работа, +/- | - | - | - | - | - |

Заведующий кафедрой радиофизики и
нелинейной динамики, профессор

В.С. Анищенко

Автор: доцент кафедры радиофизики и
нелинейной динамики, к.ф.-м.н.

А.Н. Павлов

Раздел 1. Организационно-методическое сопровождение

Курс «Вычислительная физика» читается студентам дневного отделения кафедры радиофизики и нелинейной динамики, обучающимся по специальности 014200 - биохимическая физика. Курс читается в течение 4-го учебного семестра и включает 17 часов лекционных и 51 час практических занятий. После изучения курса студенты должны освоить современные вычислительные методы, применяемые в физике при решении практических задач, научиться составлять программы, реализующие известные численные методы, и применять их на практике.

Раздел 2. Тематический план учебной дисциплины

| № п/п | Наименование раздела, подраздела, темы лекции | Бюджет учебного времени | | | | | Форма текущего и итогового контроля |
|------------------------|---|-------------------------|-------------|-----------------------------|---------------------|------------------------|-------------------------------------|
| | | Всего | в том числе | | | | |
| | | | лекции | лабораторные и практические | семинарские занятия | самостоятельная работа | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| Очная полная программа | | | | | | | |
| | Введение | 1.0 | 1.0 | - | - | - | - |
| 1. | Ошибки вычислений | 2.0 | 1.0 | 1.0 | - | - | зачет |
| 2. | Решение уравнений с одной переменной | 11.0 | 2.0 | 7.0 | - | 2.0 | зачет |
| 3. | Системы линейных алгебраических уравнений | 14.0 | 2.0 | 8.0 | - | 4.0 | зачет |
| 4. | Интерполирование функций | 15.5 | 2.5 | 7.0 | - | 6.0 | зачет |
| 5. | Аппроксимация функций | 16.0 | 2.0 | 8.0 | - | 6.0 | контрольная работа |
| 6. | Численное дифференцирование и интегрирование | 15.5 | 2.5 | 8.0 | - | 5.0 | зачет |
| 7. | Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений | 25.0 | 4.0 | 12.0 | - | 9.0 | зачет |
| Итого: | | 100.0 | 17.0 | 51.0 | - | 32.0 | |

Раздел 3. Содержание учебной дисциплины

Введение.

Основные понятия о вычислительных методах и их использование при решении практических задач. Этапы решения задачи вычислительными методами. Постановка и математическая модель задачи. Выбор метода. Алгоритм метода. Реализация метода вычислений и анализ полученных результатов.

1. Ошибки вычислений.

Виды погрешностей. Ошибки, содержащиеся в исходной информации, ошибки ограничения и округления. Понятие о плохо обусловленных и некорректных задачах. *Практический пример: разложение синуса в ряд Тейлора.*

2. Решение уравнений с одной переменной.

- 2.1. Отделение корней.
- 2.2. Метод половинного деления.
- 2.3. Метод последовательных приближений.
- 2.4. Метод Ньютона-Рафсона.

Геометрическое представление методов. Условия сходимости. Обобщение на многомерный случай. *Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ решения уравнения методом половинного деления и методом Ньютона-Рафсона. Сравнение результатов.*

3. Системы линейных алгебраических уравнений.

- 3.1. Постановка задачи. Прямые и итерационные методы.
- 3.2. Метод исключения (метод Гаусса).
- 3.3. Итерационные методы решения систем линейных уравнений.

Влияние погрешностей определения коэффициентов. Достижимая точность решения. Сравнение методов. *Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ решения системы линейных алгебраических уравнений методом исключения и методом ортогонализации. Разработка программы расчета определителя.*

4. Интерполирование функций.

- 4.1. Постановка задачи. Интерполирование многочленами.
- 4.2. Интерполяционный многочлен Лагранжа.
- 4.3. Интерполяционный многочлен Ньютона.
- 4.4. Интерполяция сплайнами. Степень и дефект сплайна. Локальные и глобальный способ задания наклонов интерполяционного кубического сплайна. Выбор метода интерполяции. *Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ интерполяции экспериментальных данных многочленами Лагранжа и кубическими сплайнами.*

5. Аппроксимация функций.

- 5.1. Обработка экспериментальных данных. Основные задачи математической статистики.
- 5.2. Метод наименьших квадратов. Геометрическая интерпретация метода.
- 5.3. Нахождение аппроксимирующей функции в виде различных элементарных функций.

Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ аппроксимации экспериментальных данных многочленами и различными элементарными функциями.

6. Численное дифференцирование и интегрирование.

- 6.1. Постановка задачи численного дифференцирования.
- 6.2. Применение интерполяционных формул Лагранжа и Ньютона.
- 6.3. Постановка задачи численного интегрирования.
- 6.4. Методы численного интегрирования: метод средних (метод прямоугольников), метод трапеций, метод Симпсона. Численные примеры и сравнение методов. *Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ численного интегрирования методом трапеций и методом Симпсона. Оценка точности вычисления интегралов. Разработка программ численного дифференцирования. Контроль точности вычисления производных.*

7. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений.

- 7.1. Общие сведения. Постановка задачи. Задача Коши. Решение с помощью рядов Тейлора.
- 7.2. Метод Эйлера. Исправленный и модифицированный методы Эйлера.
- 7.3. Метод Рунге-Кутты. Оптимизации алгоритмов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Управление выбором шага интегрирования. Сравнение методов.
- 7.4. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Модели Ван дер Поля и Релея, их сведение к системам 2-х обыкновенных дифференциальных уравнений и численное решение.

Практические занятия: разработка блок-схем и составление программ численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений методами Эйлера и его модификациями, методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Разработка программ интегрирования с контролем точности на каждом шаге.

Виды самостоятельной работы студента: чтение литературы, разработка блок-схем и программ решения задач различными численными методами.

В конце лекционного курса проводится контрольная работа для проверки знаний студентов. Контрольная проводится по материалу разделов 4,5.

Раздел 4. Перечень основной и дополнительной литературы

Основная литература:

1. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков, Численные методы. – М.: Изд-во «Бином», 2004.
2. Н.С. Бахвалов, Численные методы. – М.: Наука, 1975.
3. Е.А. Волков, Численные методы. – М.: Наука, 1982.
4. Н.В. Копченова, И.А. Марон, Вычислительная математика в примерах и задачах. – М.:Наука, 1972.
5. Д. Мак-Кракен, У. Дорн, Численные методы и программирование на ФОРТРАНе. – М.: Мир, 1977.
6. Р.В. Хэмминг, Численные методы. – М.: Наука, 1968.

Дополнительная литература:

1. К.И. Бабенко, Основы численного анализа. – М.: Наука, 1989.

2. Н.А. Хованова, И.А. Хованов, Методы анализа временных рядов. – Саратов: Изд-во ГосУНЦ «Колледж», 2001.
3. Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моллер, Машинные методы математических вычислений. – М.: Мир, 1980.
4. Н.Н. Калиткин, Численные методы. – М.: Наука, 1978.
5. Д. Поттер, Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975.
6. Д. Кук, Г. Бейз, Компьютерная математика. – М.: Наука, 1990.
7. Зарубежные библиотеки и пакеты программ по вычислительной математике. – М.: Наука, 2003.

Раздел 5. Перечень средств обучения

Материал лекций, основная и дополнительная литература, работа за компьютером

Раздел 6. Вопросы к курсу

1. Этапы решения задачи вычислительными методами. Постановка и математическая модель задачи.
2. Виды погрешностей. Ошибки, содержащиеся в исходной информации, ошибки ограничения и округления. Понятие о плохо обусловленных и некорректных задачах.
3. Решение уравнений с одной переменной. Отделение корней.
4. Метод половинного деления.
5. Метод последовательных приближений.
6. Метод Ньютона-Рафсона. Условия сходимости.
7. Прямые и итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений.
8. Метод Гаусса.
9. Интерполирование функций многочленами.
10. Интерполяционный многочлен Лагранжа.
11. Интерполяционный многочлен Ньютона.
12. Интерполяция сплайнами.
13. Аппроксимация функций.
14. Метод наименьших квадратов и его геометрическая интерпретация.
15. Численное дифференцирование на основе интерполяционных формул Лагранжа и Ньютона.
16. Методы численного интегрирования (метод прямоугольников, метод трапеций, метод Симпсона).
17. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений с помощью рядов Тейлора.
18. Метод Эйлера. Исправленный и модифицированный методы Эйлера.
19. Метод Рунге-Кутты.
20. Оптимизации алгоритмов численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Управление выбором шага интегрирования.