

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка

Інститут високих технологій

Кафедра нанофізики конденсованих середовищ

Укладач: доцент Ільченко В.В.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ПРИРОДНИЧИХ НАУКАХ

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА ДИСЦИПЛІНИ
Галузь знань: Специфічні категорії – 1801
Спеціальність: „Високі технології” – 8.18010023

Затверджено
на засіданні кафедри
Протокол № ____ від « ____ » _____ 2012 р.

Зав. кафедрою
Скришевський В.А. _____

Директор інституту
Третяк О.В. _____

КИЇВ - 2012

Робоча навчальна програма з дисципліни „Комп’ютерне моделювання в природничих науках”

Укладач: канд.. фіз.-мат. наук, доцент **Ільченко В.В.**

Лектор: канд.. фіз.-мат. наук, доцент **Ільченко В.В.**

Викладач: канд.. фіз.-мат. наук, доцент **Ільченко В.В.**

Погоджено
з науково-методичною комісією
«_____» _____ 20 12 р.

Грабчук Г.П.

Методичні рекомендації по вивченню дисципліни

Дисципліна „Комп’ютерне моделювання в природничих науках” є однією з профільюючих для спеціалізації „Високі технології”, яка викладається в 2 семестрі магістратури в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS), в тому числі 51 години аудиторних занять. З них 34 годин лекцій, 17 лабораторних. Передбачається, що студенти матимуть 57 годин самостійної роботи. Підсумковий контроль у 2 семестрі – залік.

Метою вивчення нормативної дисципліни „Комп’ютерне моделювання в природничих науках”: є ознайомлення студентів з відомими числовими алгоритмами для розв’язання фізичних задач та оволодіння ними підходами до моделювання фізичних процесів, навичками використання сучасних типових числових методів та сучасних програмних середовищ. Курс „Комп’ютерне моделювання в природничих науках” є важливою складовою підвищення професійної та практичної підготовки та вдосконалення їх знань та умінь на старших курсах.

Предмет навчальної дисципліни „Комп’ютерне моделювання в природничих науках” є числові моделі фізичних процесів, алгоритми та методи моделювання фізичних явищ.

В курсі детально розглядаються два найбільш поширених підходи до проведення моделювання: I модуль(1 кредит) – використання сіткових методів та кінцевих різницевих схем до розв’язання диференційних рівнянь; II модуль(1 кредит) – числове моделювання фізичних процесів, що описуються рівняннями математичної фізики; III модуль (1 кредит) – застосування частинкових та імовірнісних методів до розв’язання рівнянь математичної фізики та їх використання для опису досить складних модельних об’єктів, що можуть бути описані лише за допомогою числових комп’ютерних моделей, зокрема таких об’єктів як перколяційні кластери, фрактали.

Вимоги до знань та вмінь.

Знати: основні підходи для створення комп’ютерних моделей в різних природничих науках, числових різницевих схем для розв’язання рівнянь фізики, хімії та біології та застосування імовірнісних методів до створення більш складних числових моделей для фізичних, хімічних та біологічних об’єктів, що можуть бути описані за допомогою числових комп’ютерних алгоритмів.

Вміти: самостійно будувати алгоритми розв’язків задач фізики, хімії та біології та створювати числові схеми для комп’ютерного моделювання фізичних, хімічних та біологічних об’єктів за допомогою кінцевих різниць та імовірнісних методів.

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності. Дисципліна „Комп’ютерне моделювання в природничих науках” є складовою професійної та практичної підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня „магістр” на спеціалізації «Високі технології», є підсумковим курсом, що в логіко-структурній схемі освіти на старших курсах спирається на курси, що вивчалися раніше: „Вибрані розділи математики та інформаційних технологій”, „Фундаментальні основи високих технологій”.

Контроль знань

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою. Підсумкова оцінка розраховується за **накопичувальною системою**. При цьому максимальна кількість балів встановлюється наступним чином:

2 семестр	Змістовний модуль 1	Змістовний модуль 2	Змістовний модуль 3	Комплексний підсумковий модуль (залік)	Підсумкова оцінка за повний курс
Максимальна кількість балів	20	20	20	40	100

Зауваження. Оскільки комплексний підсумковий модуль (залік) в 2 семестрі включає повний об'єм матеріалу даного курсу, необхідно, щоб остаточна підсумкова оцінка враховувала б оцінки за кожний модуль семестру.

	Підсумкова оцінка за семестр	Комплексний підсумковий результат за курс (залік)	Підсумкова оцінка за повний курс
Вагові коефіцієнти	1	1	
Максимальна кількість балів	100	100	100

На семестр заплановано певну кількість контрольних та самостійних робіт, а саме: 3 контрольних та 3 самостійних та 3 лабораторних робіт:

6 семестр

За 1 контрольну роботу студент може отримати - максимум 14 балів.

За 1 самостійне завдання в першому модулі – максимум 2 бали, за 1 лабораторне завдання – 4 балів.

За перший змістовний модуль – максимум 20 балів.

За 2 контрольну роботу студент може отримати - максимум 14 балів.

За 1 самостійне завдання в другому модулі – максимум 2 бали, за 1 лабораторне завдання – 4 балів.

За перший змістовний модуль – максимум 20 балів.

За 3 контрольну роботу студент може отримати - максимум 14 балів.

За 1 самостійне завдання в третьому модулі – максимум 2 бали, за 1 лабораторне завдання – 4 балів.

За третій змістовний модуль – максимум 20 бали.

Терміни проведення модульних контролів у 2 семестрі :

1 модульний контроль – до 14 березня 2011 року;

2 модульний контроль – до 25 квітня 2011 року

3 модульний контроль – до 20 травня 2011 року;

При цьому, **кількість балів** відповідає оцінці:

1-34 – «незадовільно» з **обов'язковим повторним вивченням дисципліни**;

35-59 – «незадовільно» з **можливістю повторного складання**;

60-64 – «задовільно» («**достатньо**»);

65-74 – «задовільно»;

75 - 84 – «добре»;

85 - 89 – «добре» («**дуже добре**»);

90 - 100 – «відмінно».

Шкала відповідності

За 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно
85 – 89	4	добре
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно
60 – 64		
35 – 59	2	незадовільно
1 – 34		

Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю студент отримав сумарну оцінку за три змістовні модуля, яка менше ніж 40 балів, то студент не допускається до заліку і вважається таким, що не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом на семестр з дисципліни „Комп'ютерне моделювання в природничих науках”.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

2 семестр

Номер лекції	Назва лекції	Кількість годин				
		лекції	практичні	СРС	Контрольно-модульна робота	Інші форми контролю
ЗМ1: Різницеві схеми як засіб числового розв'язання диференційних рівнянь (1 кредит)						
1	Вступ. Загальні підходи до побудови комп'ютерних моделей та їх формалізації.	2		9		
2	Різницеві похідні та точність комп'ютерного моделювання. Приклади моделей, що застосовуються в числовому експерименті в фізиці, хімії та біології.	2	2			
3	Алгоритми Ейлера, Кромера-Ейлера та Варлетта при розв'язанні рівнянь другого порядку у повних похідних. Моделювання планетарних систем.	2				
4	Використання алгоритму середнього для моделювання коливних процесів. Фазові портрети коливних процесів. Атрактор в біологічних ситемах.	2	2	9		
5	Приклади моделей коливних систем та алгоритми, що використовуються для моделювання коливних процесів. Реакція Білоусова-Жаботинського.	2				
6	Зв'язані коливні системи. Перехід від системи рівнянь що описує зв'язані осцилятори до хвильового рівняння. Моделювання хвиль. Фур'є аналіз. Швидке перетворення Фур'є.	2	2			
	Модульна контрольна робота №1				1	

Номер лекції	Назва лекції	Кількість годин				
		лекції	практичні	СРС	Контрольно-модульна робота	Інші форми контролю
ЗМ2: Застосування різницевої схем та методу Монте-Карло для моделювання фізичних процесів (1 кредит)						
7	Моделювання та графічне описання векторних силових полів. Графічне зображення електричних та магнітних полів та числові методи що для цього використовуються в фізиці, хімії та біології.	2				

8	Загальні підходи до розв'язання дифференційних рівнянь у часткових похідних. Особливості сіткових методів що використовуються в природничих науках.	2		10		
9	Метод молекулярно-динамічної комірки та наближення що використовуються для моделювання багаточастинкових систем. Моделювання мікροканонічного та канонічного ансамблів. Модель Ізінга. Моделювання фазових переходів в фізиці, хімії та біології.	2	2			
10	Поняття про метод Монте-Карло. Алгоритми обчислення інтегралів цим методом. Похибки при моделюванні методом Монте-Карло. Інтегрування складних функцій методом Монте-Карло з найменшими похибками.	2				
11	Статистичні методи моделювання в природничих науках. Генератори випадкових чисел. Методи побудови випадкових числових послідовностей. Генерація числових послідовностей с заданим законом розподілу імовірностей.	2	2	10		
	Модульна контрольна робота №2				1	

Номер лекції	Назва лекції	Кількість годин				
		лекції	практичні	СРС	Контрольно-модульна робота	Інші форми контролю
ЗМ3: Імовірнісні підходи до моделювання фізичних процесів (1 кредит)						
12	Методи випадкового блукання. Застосування методів випадкового блукання до розв'язання задач статистичної фізики. Побудова розподілів з заданою щільністю імовірності цим методом.	2	2			
13	Поняття про перколяцію. Задача перколяції та підходи до моделювання процесів перколяції в фізиці.	2	2			
14	Алгоритм обчислення критичних значень фізичних параметрів та пошук шляхів перколяції для кристаліних ґраток різного типу. Основні теореми теорії перколяції.	2		9		
15	Критичні індекси протікання для задачі вузлів та задачі зв'язків в різних типах ґраток. Покриваючі та включаючі ґратки. Задача кіл та сфер.	2	2			

16	Фрактали. Побудова фракталів. Фрактальна розмірність. Підходи до моделювання та аналізу фрактальних систем.	2				
17	Моделювання процесів поширення електричного імпульсу у нервовому волокні. Модель Ходжкіна-Хакслі H-H ₄ . Потенціал дії. Еквівалентна схема нервового волокна. Тригерні властивості мембрани.	2	1	10		
	Модульна контрольна робота №3				1	
	ВСЬОГО	34	17	57	3	

Докладний план лекцій та самостійних завдань

2 семестр

Змістовний модуль 1: Різницеві схеми як засіб числового розв'язання диференційних рівнянь.

ЛЕКЦІЯ 1. (2 години)

Вступ. Загальні підходи до побудови комп'ютерних моделей та їх формалізації.

ЛЕКЦІЯ 2. (2 години)

Різницеві похідні та точність комп'ютерного моделювання. Приклади моделей, що застосовуються в числовому експерименті в фізиці, хімії та біології.

Лабораторна робота №1. Фізична та математична модель для задачі охолодження чашки кави. Розрахунок законів руху для коливних систем математичного(великі відхилення) та фізичного маятників.

ЛЕКЦІЯ 3. (2 години)

Алгоритми Ейлера, Кромера-Ейлера та Варлетта при розв'язанні рівнянь другого порядку у повних похідних. Моделювання планетарних систем.

ЛЕКЦІЯ 4. (2 години)

Використання алгоритму середнього для моделювання коливних процесів. Фазові портрети коливних процесів. Атрактор в біологічних ситемах.

ЛЕКЦІЯ 5. (2 години)

Приклади моделей коливних систем та алгоритми, що використовуються для моделювання коливних процесів. Реакція Білоусова-Жаботинського.

ЛЕКЦІЯ 6. (2 години)

Зв'язані коливні системи. Перехід від системи рівнянь що описує зв'язані осцилятори до хвильового рівняння. Моделювання хвиль. Фур'є аналіз. Швидке перетворення Фур'є.

Модульний контроль №1

Контрольні запитання.

1. Отримайте співвідношення для перших (лівої та правої) різницевих похідних та оцініть похибку їх обчислення.
2. Отримайте формулу для центральної різницевої похідної другого порядку та оцініть похибку її обчислення.
3. Наведіть та обгрунтуйте алгоритми Ейлера, Кромера-Ейлера та середнього на прикладі задачі охолодження тіла.

4. Отримайте систему різницевих рівнянь, що описує рух тіла кинутого під кутом до горизонту в середовищі, що чинить опір його рухові
5. Отримайте систему різницевих рівнянь алгоритму Кромера-Ейлера для обчислення траєкторії руху у випадку планетарної моделі.
6. Проаналізуйте різницеві співвідношення алгоритму Варлетта для числової моделі механічного руху тіла із змінним прискоренням.
7. Запишіть різницеві співвідношення, що дозволили б розв'язати задачу коливання математичного та фізичного маятників при великих амплітудах коливань.
8. Отримайте різницеві співвідношення для алгоритму Кромера-Ейлера для розв'язання задачі коливань в електричному колі, яке має послідовно включені ємність C , індуктивність L , опір R та зовнішнє джерело Е.Р.С.
9. Запишіть та поясніть алгоритм розрахунку профілю потенціального бар'єру в контакті метал-напівпровідник для сталого та експоненціального розподілів заряду з координатою.
10. Запишіть закони Фіка та проаналізуйте за допомогою яких алгоритмів можна розв'язати рівняння, що описують дифузію домішок у напівпровіднику. Проаналізуйте розв'язки даних рівнянь для процесів дифузії із скінченного та нескінченного джерел.

Самостійна робота студентів.

Постійними завданнями для самостійної роботи є:

- робота над лекційним матеріалом з конспектом та рекомендованою літературою;
- підготовка до лабораторних занять;
- виконання самостійних завдань;
- опрацювання частини лекційного матеріалу, винесеного на самостійне вивчення, а саме:

1. Розрахунок руху тіла для планетарної моделі за допомогою алгоритмів Ейлера-Кромера та Варлетта.
2. Моделювання процесу дифузії домішки в напівпровіднику.
3. Розрахунок профілю потенціального бар'єру в контакті метал-напівпровідник для сталого та експоненціального розподілів заряду з координатою.
4. Моделювання розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера для прямокутної потенціальної ями. Обчислення власних значень енергії.

Література: [1, 2, 3, 4, 5]

Змістовний модуль 2: Застосування різницевих схем та методу Монте-Карло для моделювання фізичних процесів.

ЛЕКЦІЯ 7. (2 години)

Моделювання та графічне описання векторних силових полів. Графічне зображення електричних та магнітних полів та числові методи що для цього використовуються в фізиці, хімії та біології.

ЛЕКЦІЯ 8. (2 години)

Загальні підходи до розв'язання диференціальних рівнянь у часткових похідних. Особливості сіткових методів що використовуються в природничих науках.

Лабораторна робота №2. Обчислення інтеграла „елементарним” методом Монте-Карло (2 підходи). Генерація випадкових чисел та перевірка якості генерації випадкових числових послідовностей на рівномірність.

ЛЕКЦІЯ 9. (2 години)

Метод молекулярно-динамічної комірки та наближення що використовуються для моделювання багаточастинкових систем. Моделювання мікроканонічного та канонічного ансамблів. Модель Ізінга. Моделювання фазових переходів в фізиці, хімії та біології.

ЛЕКЦІЯ 10. (2 години)

Поняття про метод Монте-Карло. Алгоритми обчислення інтегралів цим методом. Похибки при моделюванні методом Монте-Карло. Інтегрування складних функцій методом Монте-Карло з найменшими похибками.

ЛЕКЦІЯ 11. (2 години)

Статистичні методи моделювання в природничих науках. Генератори випадкових чисел. Методи побудови випадкових числових послідовностей. Генерація числових послідовностей з заданим законом розподілу імовірностей.

Модульний контроль №2

Контрольні запитання.

1. Опишіть загальний підхід до моделювання електричних полів та отримання графічних зображень їх силових ліній.
2. Запишіть в загальному вигляді різницеві співвідношення для моделювання магнітного поля від шнуру із струмом.
3. Отримайте хвильове рівняння, як наслідок розв'язку задачі про сукупність зв'язаних між собою осциляторів.
4. Наведіть різницеві співвідношення для розв'язання рівняння Лапласа та Пуассона.
5. Приведіть різницеву схему для „наївного методу” розв'язання хвильового рівняння.
6. Поясніть на чому базуються чисельні підходи до Фур'є аналізу. Наведіть формули Бесселя для швидкого перетворення Фур'є.
7. Описати підходи, що використовуються для моделювання ансамблів частинок в методі молекулярної динаміки.
8. Які недоліки генерації послідовностей випадкових чисел можуть проявлятися при застосуванні стандартних операторів RND.
9. Які існують засоби покращення генерації випадкових чисел з рівномірним розподілом.
10. Охарактеризуйте вплив профілю розподілу домішок в діоді Шоткі на ВАХ для випадків діодної та дифузійної теорії випростовування.

Самостійна робота студентів.

Постійними завданнями для самостійної роботи є:

- робота над лекційним матеріалом з конспектом та рекомендованою літературою;
- виконання самостійних завдань;
- опрацювання частини лекційного матеріалу, винесеного на самостійне вивчення, а саме:

1. Отримати графічне зображення картини силових ліній для чотирьох елементарних точкових зарядів розташованих у вершинах квадрату.
2. Опрацювати різницеву схему що використовується для розв'язання рівняння Лапласа.
3. Моделювання вольт-амперної характеристики контакту метал-напівпровідник для одного типу носіїв заряду.
4. Отримайте нормальний розподіл методом випадкового блукання.

Література: [1, 2, 4, 7, 8, 9, 10]

Змістовний модуль 3: Імовірнісні підходи до моделювання фізичних процесів

ЛЕКЦІЯ 12. (2 години)

Методи випадкового блукання. Застосування методів випадкового блукання до розв'язання задач статистичної фізики. Побудова розподілів з заданою щільністю імовірності цим методом.

ЛЕКЦІЯ 13. (2 години)

Поняття про перколяцію. Задача перколяції та підходи до моделювання процесів перколяції в фізиці.

Лабораторна робота №3. Визначення критичного індексу для задачі вузлів в моделі протікання через квадратну ґратку.

ЛЕКЦІЯ 14. (2 години)

Алгоритм обчислення критичних значень фізичних параметрів та пошук шляхів перколяції для кристаліних ґраток різного типу. Основні теореми теорії перколяції.

ЛЕКЦІЯ 15. (2 години)

Критичні індекси протікання для задачі вузлів та задачі зв'язків в різних типах ґраток. Покриваючі та включаючі ґратки. Задача кіл та сфер.

ЛЕКЦІЯ 16. (2 години)

Фрактали. Побудова фракталів. Фрактальна розмірність. Підходи до моделювання та аналізу фрактальних систем.

ЛЕКЦІЯ 17. (2 години)

Моделювання процесів поширення електричного імпульсу у нервовому волокні. Модель Ходжкіна-Хакслі Н-Н₄. Потенціал дії. Еквівалентна схема нервового волокна. Тригерні властивості мембрани.

Модульний контроль №3

Контрольні запитання.

1. В чому полягає метод Монте-Карло для обчислення інтегралів(2 підходи)?
2. Як визначається точність обчислення інтегралу методом Монте-Карло?
3. В чому полягає метод випадкового блукання і де він застосовується.
4. Які методи генерації числових послідовностей із заданим розподілом щільності імовірності ви знаєте?
5. Що означає термін перколяція. Що таке критичний індекс.
6. Наведіть приклади фізичних процесів де спостерігається явище перколяції.
7. Опишіть алгоритм пошуку шляхів перколяції.
8. Дайте визначення поняттям: покриваюча ґратка та включаюча ґратка.
9. Як співвідносяться критичні індекси для ґраток з різними координаційними числами.
10. Дайте визначення поняттю фрактал. Як можна обчислити розмірність фракталу.

Самостійна робота студентів.

Постійними завданнями для самостійної роботи є:

- робота над лекційним матеріалом з конспектом та рекомендованою літературою;
- виконання самостійних завдань;
- опрацювання частини лекційного матеріалу, винесеного на самостійне вивчення, а саме:

1. Отримати розподіл за енергією атомів ідеального газу за допомогою моделі демона Максвелла.
2. Розрахуйте критичний радіус для стрибкової домішкової провідності в напівпровіднику.

Література: [2, 4, 7, 8, 9, 10]

Підсумковий контроль – залік.

Перелік рекомендованої літератури

Основна:

1. Х.Гулд, Я.Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. В 2-х томах. М., Мир, 1990, 750 с.
2. С.В.Поршнеv. Matlab 7 Основы работы и программирования. М: Биноm, 2006, 319 с.
3. Р.П. Федоренко. Введение в вычислительную физику. М.: МФТИ, 1994, 330 с.
4. А.А. Самарский. Введение в численные методы. - М: Наука, 1987, 210 с.
5. Дж.Форсайт, В.Вазов. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М., Иностранная литература, 1963р, 487 с.
6. А.А. Самарский. Теория разностных схем.- М: Наука, 1977, 354 с.
7. И.М. Соболев. Численные методы Монте-Карло.- М.: Наука, 1973, 174с.
8. К. Жаблон, Ж.К. Симон. Применение ЭВМ для численного моделирования в физике. -М.: Наука, 1983, 240 с.
9. Д. Поттер Вычислительные методы в физике.-М.: Наука, 1975, 560 с.
10. Н.Н. Калиткин. Численные методы. - М.: Наука, 1978, 220 с.
11. А.М.Бубенников. Моделирование интегральных технологий микроэлектроники. М., Высшая школа, 1989, 319 с.
12. Б.С.Польский. Числовое моделирование полупроводниковых приборов. Рига, Зинамне, 1996р., 147 с.

Додаткова:

13. Б.Н. Четверушкин. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. -М.: Наука, 1985, 120 с.
14. А.А. Самарский, Ю.П. Попов. Разностные методы решения задач газовой динамики .-М.: Наука, 1992, 240 с.
15. Г.И.Марчук, В.И Лебедев. Численные методы в теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1981, 454 с.
16. Г.И. Марчук Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982, 350 с.
17. Ю.Н. Днестровский, Д.П. Костомаров. Математическое моделирование плазмы.- М.: Наука, 1993, 320 с.