

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 80 20-2019, учебных планов № G31и-121/уч. и G31а-122/уч. от 30.12.2019 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

О.Г. Романов — заведующий кафедрой компьютерного моделирования Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

С.В. Баханович — заместитель директора Института математики НАН Беларуси по научной и инновационной работе, кандидат физико-математических наук;

А.Н. Фурс — заведующий кафедрой теоретической физики и астрофизики Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой компьютерного моделирования
(протокол № 16 от 25 мая 2020 г.);

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 5 от 17 июня 2020 г.)

Заведующий кафедрой _____

Романов О.Г.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа учебной дисциплины «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» разработана для специальности второй ступени высшего образования 1-31 80 20 Прикладная физика, профилизация: Сильноточная электроника. Преподавание по учебной дисциплине ведется на английском языке.

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины — ознакомление студентов с методами современной вычислительной физики, методами проведения вычислительных экспериментов и методами обработки результатов физических экспериментов.

Задачи учебной дисциплины: выработка умений использования методов вычислительного эксперимента при решении фундаментальных задач и проектировании прикладных моделей для последующей работы в исследовательской и инженерной деятельности.

Излагаются классические подходы к проведению вычислительных экспериментов и современные достижения вычислительной физики в решении прикладных задач. Изучаются принципы построения теоретических, численных и компьютерных моделей физических процессов, а также принципы и методы обработки результатов физических экспериментов, выполняемых на современном исследовательском оборудовании. Рассматриваются методы численного моделирования гидро- и аэродинамических задач, задач прикладной электродинамики.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием (магистра) — ознакомление с современными достижениями вычислительной физики в решении прикладных и исследовательских задач.

Учебная дисциплина «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» относится **к модулю** «Математические методы в физике» государственного компонента.

Связи с другими учебными дисциплинами.

Материал дисциплины основан на знаниях и представлениях, заложенных в дисциплине государственного компонента первой ступени высшего образования специальности 1-31 04 01 Физика (по направлениям) «Программирование и математическое моделирование» и дисциплине государственного компонента второй ступени высшего образования специальности 1-31 80 20 Прикладная физика «Современные проблемы физики». Материал дисциплины используется во время прохождения производственной практики и при подготовке диссертации на соискание ученой степени магистра.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» должно обеспечить формирование следующих **универсальных и углубленных профессиональных компетенций:**

универсальные компетенции:

УК-3. Быть способным использовать фундаментальные математические знания для анализа, верификации, оценки полноты информации в ходе профессиональной деятельности, при необходимости восполнять и синтезировать недостающую информацию, работать в условиях неопределенности;

углубленные профессиональные компетенции:

УПК-6. Быть способным понимать и применять в профессиональной деятельности методы вычислительного эксперимента, квалифицированно проводить численные расчеты физических объектов и процессов.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

– методы проведения вычислительных экспериментов при решении прикладных и исследовательских задач;

уметь:

– использовать достижения современной вычислительной физики в решении прикладных задач;

– использовать вычислительные комплексы при решении прикладных задач в вычислительной гидро- и аэродинамике, вычислительной электродинамике, моделировании мультифизических задач;

владеть:

– терминологией и новой информацией о современных методах проведения вычислительного эксперимента и обработки результатов физического эксперимента, иметь опыт работы с научной литературой.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается во 2 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Вычислительные методы в физике и физическом эксперименте» отведено:

– для очной формы получения высшего образования — 108 часов, в том числе 48 аудиторных часов, из них: лекции — 24 часа, практические занятия — 16 часов, управляемая самостоятельная работа – 8 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма текущей аттестации — экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Topic 1. Computational experiment. The main stages of the computational experiment: “model-algorithm-program”. Modern technologies for conducting a computational experiment.

Topic 2. General principles for the construction of physical and mathematical models of phenomena and processes. Physical laws expressed by ordinary differential equations.

Topic 3. Mathematical methods in computational physics. The finite difference method. Approximation of derivatives. Construction of finite difference schemes. Convergence. Approximation. Sustainability. Finite element method.

Topic 4. Modeling of oscillatory systems. The concept of oscillatory systems. Free and damped oscillations, forced oscillations, resonance. Nonlinearity effects: frequency doubling, nonlinear resonances.

Topic 5. Basic equations of mathematical physics in a computational experiment. Stationary fields and their description. Equations of elliptic type, statement of the problem. Relaxation processes. Heat distribution processes, diffusion. Equations of the parabolic type. Transport equation. Propagation of small vibrations and disturbances. Hyperbolic equations.

Topic 6. Elements of computational fluid dynamics. Motion of a compressible fluid (gas). Euler equations. Lagrange equations. Finite-difference approximations of the equations of motion. Equation of motion of inviscid compressible fluid. Practical implementation of numerical and computer models. Equations of motion of a viscous incompressible fluid. A method for solving the equations of motion in variables "vorticity – stream function". The problem of flowing around an obstacle with a fluid (gas) stream. Modeling Rayleigh – Benard convection. Modeling Rayleigh-Taylor instability. Modeling Kelvin-Helmholz instability.

Topic 7. Elements of computational electrodynamics. Maxwell's equations. Methods of numerical solution. Finite-difference approximation in the time domain (FDTD method). Practical implementation of numerical and computer models. Application of the FDTD method for solving nanophotonics problems. Modeling of the processes of propagation of ultrashort laser pulses. Modeling the propagation of electromagnetic radiation in metamaterials and photonic crystals. Laser beam propagation models. Wave equation. Computing simulations in nonlinear optics.

Topic 8. Modeling laser-matter interaction. The effect of laser radiation on metals. "Thermal" and "hydrodynamic" mechanisms of metal destruction at moderate radiation flux densities. Modeling the interaction of laser radiation with polymeric materials. Propagation of laser radiation in biological tissues. Thermal and thermomechanical effect of laser radiation on biological tissue.

Topic 9. Simulation of quantum systems. Stationary Schrödinger equation. Time-dependent Schrödinger equation. Modeling of wave-packet dynamics.

Topic 10. Methods of processing the results of physical experiments. Dependency research. Smoothing results. Approximation of functions. Fourier

analysis. Software for processing measurement results. Smoothing of experimental data using the least squares method. The main distribution functions used in error theory and mathematical statistics.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР (ДО)	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Аудиторный контроль УСР		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Computational experiment	2						Quiz
2	General principles for the construction of physical and mathematical models of phenomena and processes	2						Quiz
3	Mathematical methods in computational physics	2						Quiz
4	Modeling of oscillatory systems	2	2			2		Quiz Written re- port
5	Basic equations of mathematical physics in a computational experiment	4						Quiz Test
6	Elements of computational fluid dynamics	4	4			2		Quiz Written re- port
7	Elements of computational electrodynamics	4						Quiz Test
8	Modeling laser-matter interaction	2						Quiz
9	Simulation of quantum systems	2	2			2		Quiz

1	2	3	4	5	6	7	8	9
								Written re- port
10	Methods of processing the results of physical experiments		8			2		Quiz Written re- port
	Total	24	16			8		Exam

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Computational physics, D. Potter (Wiley, New York NY, 1973).
2. Numerical recipes in C: the art of scientific computing, W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vettering, and B.R. Flannery (Cambridge University Press, Cambridge UK, 1992).
3. Computational physics, N.J. Giordano (Prentice-Hall, Upper Saddle River NJ, 1997).
4. A First Course in Computational Physics and Object-Oriented Programming with C++, David Yevick (University of Waterloo, Ontario, 2005)
5. Introductory Computational Physics, A.Klein, A.Godunov (Cambridge Univ. Press, 2006)
6. Computational Physics, J.M.Thijssen (Cambridge Univ. Press, 2007)
7. A Short Course in Computational Science and Engineering C++, Java and Octave Numerical Programming, David Yevick, (University of Waterloo, Ontario, 2012)
8. Applied Computational Physics, J.F. Boudreau, E.S. Swanson, Oxford, 2017
9. Computational Physics. Simulation of Classical and Quantum Systems, Ph. O.J. Scherer, (Springer, 2013)
10. Computational Physics - A Practical Introduction to Computational Physics and Scientific Computing (using C++), K. Anagnostopoulos (Ilulu.com, 2016)
11. An Introductory Guide to Computational Methods for the Solution of Physics Problems, G.Rawitscher, V.dos Santos Filho, Th. Carvalho (Springer, 2018).

Перечень дополнительной литературы

1. Fanjul-Vélez Félix, Romanov Oleg G., Arce-Diego José Luis. Efficient 3D numerical approach for temperature prediction in laser irradiated biological tissue // Computers in Biology and Medicine. – 2009. – V.39. – № 9. – P.810-817.
2. Romanov O.G., Tolstik A.L., Ortega-Quijano N., Fanjul-Vélez F., Arce-Diego J.L. Finite-difference time-domain simulation of light propagation in 2D scattering media. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 2009, V.12, №3, p.267–274.
3. Romanov O.G., Zheltov G.I., Romanov G.S. Numerical modeling of the action of pulse laser radiation on small absorbing targets // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2010, V.74, Number 12, P.1674-1678.
4. N. Ortega-Quijano, O. G. Romanov, F. Fanjul-Vélez, I. Salas-García, A. L. Tolstik, J. L. Arce-Diego Numerical modeling of light propagation in biological tissues: time-resolved 3D simulations based on light diffusion model

- and FDTD solution of Maxwell's equations // Proceedings of SPIE. – 2011. – Vol.8088. – P.80881R-80888R.
5. O.G. Romanov, G.I. Zheltov, G.S. Romanov. Numerical modeling of thermomechanical processes in absorption of laser radiation in spatially inhomogeneous media // Journal of Engineering Physics and Thermophysics, 2011. Vol. 84, No. 4, P.772-780.
 6. O.G. Romanov, G.S. Romanov, G.I. Zheltov. Numerical modelling of photo-thermal and photo-mechanical effects in absorbing biological structures under action of short laser pulses // Proceedings of SPIE. 2013. V. 8803. P.88030P – 88030P-7.
 7. O.G. Romanov. Optical Bistability, Switching Waves and Pattern Formation in Nonlinear Microcavities: Numerical Solution of Maxwell Equations // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2017. V.20. №3. P.294-300.
 8. O.G. Romanov, G.I. Zheltov. Laser excitation of acoustic pulses in absorbing and scattering tissues: numerical solution of three-dimensional problems // Proc. SPIE V.11079 Medical Laser Applications and Laser-Tissue Interactions IX, P.110791B (22 July 2019)

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой оценки

1. Устные опросы.
2. Письменные отчеты.
3. Тестирование

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать письменные отчеты, устные опросы, тестирование. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно.

Оценка за ответы на лекциях (опрос) занятиях включает в себя полноту ответа, наличие аргументов, примеров из практики.

Письменный отчет по заданиям УСР включает в себя результаты проведенных вычислительных экспериментов, их анализ и интерпретацию. Оценка письменных отчетов проводится по десятибалльной шкале. При оценивании письменного отчета обращается внимание на содержание и полноту проведенных вычислительных экспериментов, корректность их интерпретации, оформление.

Тестирование проводится в письменной форме. На выполнение письменного теста отводится 45 мин.

Формирование оценки за текущую успеваемость:

- Опрос – 10%;
- Письменные отчеты – 40%;
- Тестирование – 50%.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме экзамена.

Оценка текущей успеваемости служит для определения допуска к экзамену по дисциплине. В случае получения неудовлетворительной (ниже 4 баллов) оценки по текущему контролю обучающийся не допускается к экзамену.

Рейтинговая оценка по дисциплине рассчитывается на основе оценки текущей успеваемости и экзаменационной оценки с учетом их весовых коэффициентов. Вес оценка по текущей успеваемости составляет 50 %, экзаменационная оценка - 50 %.

Примерная тематика практических занятий

1. Моделирование колебательных систем.
2. Численное решение уравнений движения в форме Лагранжа.
3. Моделирование конвекция Рэлея–Бенара в приближении Буссинеска.
4. Моделирование туннельного эффекта в квантовых системах.
5. Сглаживание экспериментальных данных методом наименьших квадратов.
6. Основные функции распределения, используемые в теории ошибок и математической статистике.
7. Фурье-анализ.
8. Программное обеспечение для обработки результатов измерений.

Примерный перечень тем письменного тестирования

1. Математические методы в вычислительной физике
2. Основные уравнения математической физики в вычислительном эксперименте
3. Основы вычислительной гидродинамики
4. Основы вычислительной электродинамики

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема № 4. Моделирование колебательных систем.

1. Изучить теоретический материал по теме: Моделирование колебательных систем.
2. С помощью программы «Modeling of oscillations.exe» смоделируйте следующие режимы работы колебательной системы: свободные колебания (гармонические, затухающие); вынужденные колебания (исследовать зависимость от частоты движущей силы, получить биения и резонансные

режимы без затухания и с затуханием, сравнить результаты); нелинейные колебания (исследовать зависимость частоты колебаний от амплитуды) для случаев: а) квадратичная нелинейность, б) кубическая нелинейность.

3. Исследовать типичные временные зависимости, фазовые портреты и спектры Фурье.

Форма контроля – письменный отчет.

Тема № 6. Элементы вычислительной гидродинамики.

1. Изучить теоретический материал по теме: Моделирование конвекции Рэлея-Бенара.

2. Используя двухмерный симулятор конвекции 2D Rayleigh-Benard convection.exe, выполните вычислительные эксперименты для моделирования конвекции Рейли-Бенара:

а) Смоделировать явление конвекции в различных пространственных масштабах, параметрах среды и начальном градиенте температуры. При этом изменять значения параметров в поле «Параметры», проводить расчеты и сохранять данные (скриншоты) для подготовки отчета.

б) Для выбранного пространственного масштаба определить критическое число Ричардсона, при котором начинается формирование упорядоченной структуры восходящих и нисходящих потоков.

в) Изучить зависимость пространственного периода реализованных структур от толщины слоя, числа Ричардсона и градиента температуры.

Форма контроля – письменный отчет.

Тема № 9. Моделирование туннельного эффекта в квантовых системах.

1. Изучить теоретический материал по теме: Моделирование динамики волновых пакетов.

2. Используя программу-симулятор 1D tunneling.exe, провести вычислительные эксперименты для моделирования распространения волнового пакета через потенциальный барьер.

3. Исследовать и построить зависимость коэффициента пропускания от энергии (для разных значений толщины барьера).

Форма контроля – письменный отчет.

Тема № 10. Методы обработки результатов физических экспериментов.

1. Изучить теоретический материал по теме: Сглаживание экспериментальных данных методом наименьших квадратов.

2. Сгенерировать последовательность случайных «измерений» y_i и x_i .

3. В соответствии с алгоритмом, описанным в теоретическом материале, аппроксимировать данные «измерений» линейной функцией $y=ax+b$, используя метод наименьших квадратов. Для этого написать программный код, используя Wolfram, MATLAB или любой известный язык программирования.

4. Нарисовать график, содержащий результаты «измерений» y_i (x_i) и график полученной функции $y=ax+b$.

5. Выполнить задачу пунктов 3-4 с помощью программного обеспечения Origin (или другого аналогичного программного обеспечения).

6. Сравнить результаты.

Форма контроля – письменный отчет.

Отчеты с выполненными заданиями загружаются студентом в соответствующий курс на образовательном портале БГУ (eduphys.bsu.by) либо высылается преподавателю по электронной почте.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется *практико-ориентированный подход*, который предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;

метод учебной дискуссии, который предполагает участие студентов в целенаправленном обмене мнениями, идеями для предъявления и/или согласования существующих позиций по определенной проблеме. Использование метода обеспечивает появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по индивидуально заданной проблеме курса;
- изучение материала, вынесенного на самостоятельную проработку;
- проведение вычислительных экспериментов с использованием компьютерных программ – симуляторов физических процессов;
- подготовка к экзамену.

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Основные этапы проведения вычислительного эксперимента. Схема Самарского: «модель-алгоритм-программа».
2. Конечно-разностные аппроксимации производных. Погрешность аппроксимации.
3. Построение разностных схем. Явные и неявные схемы. Двухслойные и трехслойные схемы.
4. Устойчивость разностных схем.

5. Метод конечных элементов.
6. Физические законы, выражающиеся обыкновенными дифференциальными уравнениями.
7. Методы обработки результатов физических экспериментов
8. Понятие о колебательных системах. Свободные и затухающие колебания, вынужденные колебания, резонанс.
9. Эффекты нелинейности в колебательных системах: удвоение частоты, нелинейные резонансы.
10. Алгоритм моделирования методом молекулярной динамики. Моделирование многочастичных систем методом молекулярной динамики.
11. Стационарные поля и их описание. Уравнения эллиптического типа.
12. Уравнения параболического типа. Процессы распространения тепла, диффузия.
13. Уравнение переноса.
14. Распространение малых колебаний и возмущений. Уравнения гиперболического типа.
15. Движение сжимаемой жидкости (газа). Уравнения Эйлера. Уравнения Лагранжа.
16. Конечно-разностные аппроксимации уравнений движения в форме Эйлера.
17. Конечно-разностные аппроксимации уравнений движения в форме Лагранжа.
18. Уравнения движения вязкой несжимаемой жидкости. Методы решения уравнений движения в переменных «вихрь-функция тока».
19. Моделирование конвекции Рэлея–Бенара в приближении Буссинеска.
20. Уравнения Максвелла. Методы численного решения.
21. Конечно-разностная аппроксимация уравнений Максвелла во временной области (FDTD-метод).
22. Моделирование процессов распространения сверхкоротких лазерных импульсов в линейных и нелинейных средах.
23. Моделирование распространения электромагнитного излучения в метаматериалах.
24. Моделирование распространения электромагнитного излучения в фотонных кристаллах.
25. Моделирования процессов воздействия лазерного излучения на полимерные материалы.
26. Моделирование теплового и термомеханического действие лазерного излучения на биоткани.
27. Моделирование квантовых явлений.
28. Методы обработки результатов физических экспериментов.
29. Фурье-анализ.
30. Основные функции распределения, используемые в теории ошибок и математической статистике.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Методы математического моделирования физических процессов	кафедра высшей математики и математической физики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 16 от 25.05.2020 г.)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры компьютерного моделирования (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой
компьютерного моделирования
к.ф.-м.н., доцент _____ **О.Г. Романов**

УТВЕРЖДАЮ
Декан физического факультета
к.ф.-м.н., доцент _____ **М.С. Тиванов**