Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра фізики кристалів

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Проректор
з науково-педагогічної роботи

"______"_______________2020 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Комп'ютерне моделювання фізичних процесів і явищ

(шифр і назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти другий (магістр)

/

галузь знань 10 – природничі науки

(шифр і назва)

спеціальність 104 – фізика та астрономія

(шифр і назва)

освітня програма освітньо-наукова - фізика

(шифр і назва)

спеціалізація

(шифр і назва)

вид дисципліни обов'язкова

(обов'язкова / за вибором)

факультет фізичний

2020 / 2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету “21” червня 2020 року, протокол № 6

Розробники програми:

Мацокін Дмитро Вадимович, канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики кристалів

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 7 від “20” червня 2020 р.

Завідувач кафедрою кафедри фізики кристалів

________________________ (Гриньов Б.В.)

(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

____

Протокол № 6 від. “20” червня 2020 р.

Голова __________________ (Макаровський М.О.)

(підпис) (прізвище та ініціали)

Програма навчальної дисципліни "Комп'ютерне моделювання фізичних процесів і явищ" складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки магістра

спеціальності 104 – фізика та астрономія

Предметом вивчення навчальної дисципліни є типові математичні моделі фізичних процесів та явищ і їх комп'ютерна реалізація.

1. Опис навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни є: ознайомити студентів з основними підходами до комп'ютерного моделювання фізичних систем, які описуються математичними рівняннями, що не можна точно розв'язати, сформувати практичні навички постановки та розв'язання відповідних задач.

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: основні методи моделювання динамічних фізичних систем, систем, які описуються диференційними рівняннями у часткових похідних.

вміти: моделювати динаміку систем багатьох частинок методами молекулярної динаміки; систем, які описуються диференційними рівняннями у часткових похідних, методами кінцевих різниць та кінцевих елементів; досліджувати стійкість рішення.

Кількість кредитів – 5.

Загальна кількість годин – 150.

Характеристика навчальної дисципліни	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
6-й	-й
Семестр	
12-й	-й
Лекції	
22 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
33 год.	год.
Самостійна робота	
95 год.	год.
Індивідуальні завдання	
год.	

Форма контролю – залік.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Тема 1. Можливості і обмеження комп‘ютерного моделювання фізичних процесів.

Тема 2. Числове розв‘язання диференційних рівнянь у часткових похідних. Методи кінцевих різниць та кінцевих елементів. Стійкість рішення.

Тема 3. Моделювання динаміки систем багатьох частинок. Близькодія та далекодія. Методи молекулярної та дискретної дислокаційної динаміки. Крайові та граничні умови. Визначення макроскопічних величин. Хаотичний рух динамічних систем. Ентропія та наближення до рівноваги. Методи Монте-Карло.

Тема 4. Обчислювальна складність комп‘ютерних моделей. Методи розпаралелювання обчислень.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин											
	Денна форма						Заочна форма					
	Усього	у тому числі					Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср		л	п	лаб	інд	ср
1	2	3	4	5	6	7	8	9	1 0	11	12	13
Тема 1.	10	2				8						
Тема 2.	46	8		12		26						
Тема 3.	62	8		17		37						
Тема 4.	32	4		4		24						
Разом за модулем 1	150 22		3 3		95							

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Виникнення випадковостей при моделюванні динаміки класичних динамічних систем	8
2	Аналіз стійкості кінечно-різницевих схем для рівняння теплопровідності	26
3	Відмінності моделювання динаміки систем багатьох частинок з	37

	близькодією та з далекодією	
4	Оптимізація алгоритмів для їх ефективного розпаралелювання	24
	Разом	95

7. Методи контролю

Форма контролю – залік.

Приклади завдань:

Варіант №1

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t=0,x) = \sin \pi x$

Граничні умови $\begin{cases} u(t,x=0) = 2 \\ u(t,x=1) = \sin^2(\pi t) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t,x)$

Варіант №2

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t=0,x) = 0$

Граничні умови $\begin{cases} u(t,x=0) = \sin^2(\pi t) \\ u(t,x=1) = \sin^2(\pi t)\cos^2(\pi t) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t,x)$

Варіант №3

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t=0,x) = \sin \pi x$

Граничні умови $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin^2 \pi t + \cos^2 2\pi t \\ u(t, x=1) = \sin^2 \pi t \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №4

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t = 0, x) = x$

Граничные условия $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin^2 \pi t \\ u(t, x=1) = \cos^2 \pi t \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №5

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 6 \end{cases}$

Початкові умови $u(t = 0, x) = \sin\left(\frac{\pi}{2} x\right)$

Граничні умови $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin^2\left(\frac{\pi}{2} t\right) \\ u(t, x=1) = \cos^2(2\pi t) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №6

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 6 \end{cases}$

Початкові умови $u(t = 0, x) = \sin\left(\frac{\pi}{2} x\right)$

Граничні умови $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin^2(2\pi t) \\ u(t, x=1) = \cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}t\right) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №7

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t=0, x) = \sin\left(\dfrac{\pi}{2}x\right)$

Граничні умови $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin\left(\dfrac{\pi}{10}t\right) \\ u(t, x=1) = \cos^2(\pi t) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №8

Розв‘язати диференційне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ на интервалі $\begin{cases} 0 \le x \le 1 \\ 0 \le t \le 10 \end{cases}$

Початкові умови $u(t=0, x) = x$

Граничні умови $\begin{cases} u(t, x=0) = \sin^2\left(\dfrac{\pi}{5}t\right) \\ u(t, x=1) = \cos^2(\pi t) \end{cases}$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №9

Промоделювати динаміку частинок двохвимірного ідеального газу у сосуді із пружними стінками.

Взяти 10 – 15 частинок і малювати траєкторії їх руху, доки з кожною не відбудеться 5 – 6 зіткнень з іншими частинками. Потім “звернути” час та слідкувати за рухом частинок той саме час, що й спочатку.

За початкові умови взяти випадкові координати частинок та їх швидкості.

Варіант №10

Промоделювати динаміку частинок двохвимірного ідеального газу у сосуді із пружними стінками.

Взяти не менше 100 частинок та моделювати їх рух у сосуді. Малювати графік розподілу частинок за швидкостями.

За початкові умови взяти випадкові координати частинок та їх швидкості.

Варіант №11

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ Н/м^2.

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $\upsilon_{glide} = 2 \cdot 10^{-3} f$, швидкість переповзання $\upsilon_{climb} = 8 \cdot 10^{-4} f$.

Задати початкові умови:

В бесконечном кристалле есть 4 полосы скольжения длиной 100 мкм каждая, расстояние между полосами 30 мкм. В каждой полосе одинаковое число дислокаций (не менее 20), расположенных случайно. Ширина полосы 1 мкм. Промоделировать начальную стадию процесса полигонизации.

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №12

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ Н/м^2.

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $\upsilon_{glide} = 2 \cdot 10^{-3} f$, швидкість переповзання $\upsilon_{climb} = 8 \cdot 10^{-4} f$.

Задати початкові умови:

В полубесконечном кристалле, ограниченном одной свободной поверхностью $x = 0$, есть 5 полос скольжения длиной 100 мкм каждая, расстояние между полосами 30 мкм. В каждой полосе одинаковое число дислокаций (не менее 20), расположенных случайно. Ширина полосы 1 мкм. Промоделировать начальную стадию процесса полигонизации.

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №13

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ Н/м^2.

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $\upsilon_{glide} = 2 \cdot 10^{-3} f$, швидкість переповзання $\upsilon_{climb} = 8 \cdot 10^{-4} f$.

Задати початкові умови:

В бесконечном кристалле есть 4 дислокационных стенки (малоугловые границы) длиной 150 мкм каждая, состоящих из дислокаций с вектором Бюргерса $\vec{b} = (b,0,0)$, расстояние между стенками 30 мкм. Посередине их пересекает одна дислокационная стенка, состоящая из дислокаций с вектором Бюргерса $\vec{b} = (0,b,0)$, Дислокации в стенках расположены на равных расстояниях друг от друга. В каждой стенке одинаковое число дислокаций (не менее 20).

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №14

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ Н/м^2.

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $\upsilon_{glide} = 2 \cdot 10^{-3} f$, швидкість переповзання $\upsilon_{climb} = 8 \cdot 10^{-4} f$.

Задати початкові умови:

В бесконечном кристалле есть 3 дислокационных стенки (малоугловые границы) длиной 150 мкм каждая, состоящих из дислокаций с вектором Бюргерса $\vec{b} = (b,0,0)$, расстояние между стенками 30 мкм. Посередине их пересекает одна дислокационная стенка, состоящая из дислокаций с вектором Бюргерса $\vec{b} = (0,b,0)$, Дислокации в стенках расположены на равных расстояниях друг от друга. В каждой стенке одинаковое число дислокаций (не менее 20).

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Сума
Т1	Т2	Т3	Т4	Залік	100
30				70	

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). М.: Мир, 1990, 750 с.
2. Боровков А.А. Математическая статистика. М.: Наука, 1984.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
4. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. М.: Физматлит, 1997.
5. Математическое моделирование / Под ред. А.Н. Тихонова, В.А. Садовничего и др. М.: Изд-во МГУ, 1993.
6. В.И. Приклонский. Численные методы. Физический ф-т МГУ, 2000.
7. Р.П. Федоренко. Введение в вычислительную физику. М. МФТИ, 1994.

8 Поттер д. Вычислительные методы в физике. М., Мир. 1975.

9 Кунин В. Вычислительная физика. М., Мир, 1979.