Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра фізики кристалів

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Декан
фізичного факультету

Руслан ВОВК
"______"______________2023 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

2023/2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

30 серпня 2023 року, протокол № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: Мацокін Д.В., канд. фіз.- мат. наук., доцент кафедри фізики кристалів.

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол № 6 від 28 серпня 2023 року

Завідувач кафедри Гриньов Б. В.

____
(підпис)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником проектної групи)____
назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми
(керівник проектної групи)

Бойко Ю.І.

____
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 7 від 29 серпня 2023 року

Голова методичної комісії Макаровський М.О.

____
(підпис)

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	
16 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
30 год.	год.
Самостійна робота	
104 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	10	11	12	13
Тема 1.	19	2				17						
Тема 2.	44	6		12		26						
Тема 3.	55	4		14		37						
Тема 4.	32	4		4		24						
Разом за модулем 1	150	16		30		104						

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Виникнення випадковостей при моделюванні динаміки класичних динамічних систем	17
2	Аналіз стійкості кінечно-різницевих схем для рівняння теплопровідності	26
3	Відмінності моделювання динаміки систем багатьох частинок з близькодією та з далекодією	37
4	Оптимізація алгоритмів для їх ефективного розпаралелювання	24

	Разом	104

6. Варіанти завдань для розрахунково-графічної роботи

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

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

Варіант №7

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

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

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

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 $u(t, x)$

7. Методи контролю

Форма контролю – залік.

Приклади завдань:

Варіант №1

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 №2

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 №3

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\quad \dfrac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ 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 нескінченному кристалі є 4 полоси ковзання довжиною 100 мкм кожна, відстань поміж полосами 30 мкм. В кожній полосі однакова кількість дислокацій (не менше 20), що розташовані випадково. Ширина полоси 1 мкм. Промоделювати початкову стадію процесу полігонізації.

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 №4

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\quad \dfrac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ 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:

У напівнескінченному кристалі, що обмежений однією вільною поверхнею $x = 0$, є 5 полос ковзання довжиною 100 мкм кожна, відстань поміж полосами 30 мкм. В кожній полосі однакова кількість дислокацій (не менше 20), що розташовані випадково. Ширина полоси 1 мкм. Промоделювати початкову стадію процесу полігонізації.

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 №5

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\quad \dfrac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ 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 нескінченному кристалі є 4 дислокаційні стінки (малокутові границі) довжиною 150 мкм кожна, що складаються з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = (b,0,0)$, відстань поміж стінками 30 мкм. Посередині їх перетинає одна дислокаційна стінка, що складається з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = (0,b,0)$. Дислокації в стінках розташовані на однакових відстанях поміж собою. В кожній стінці однакова кількість дислокацій (не менше 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 №6

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\quad \dfrac{\mu}{\pi(1-\nu)} = 4 \cdot 10^{10}$ 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 нескінченному кристалі є 3 дислокаційні стінки (малокутові границі) довжиною 150 мкм кожна, що складаються з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = (b,0,0)$, відстань поміж стінками 30 мкм. Посередині їх перетинає одна дислокаційна стінка, що складається з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = (0,b,0)$. Дислокації в стінках розташовані на однакових відстанях поміж собою. В кожній стінці однакова кількість дислокацій (не менше 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

<table>
<tr><td colspan="6">Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання</td><td>Сума</td></tr>
<tr><td>Т1</td><td>Т2</td><td>Т3</td><td>Т4</td><td>Розрахунково-графічна робота</td><td>Залік</td><td rowspan="2">100</td></tr>
<tr><td colspan="4">30</td><td>30</td><td>40</td></tr>
</table>

Шкала оцінювання

<table>
<tr><td rowspan="2">Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру</td><td colspan="2">Оцінка</td></tr>
<tr><td>для чотирирівневої шкали оцінювання</td><td>для дворівневої шкали оцінювання</td></tr>
<tr><td>90 – 100</td><td>відмінно</td><td rowspan="3">зараховано</td></tr>
<tr><td>70-89</td><td>добре</td></tr>
<tr><td>50-69</td><td>задовільно</td></tr>
<tr><td>1-49</td><td>незадовільно</td><td>не зараховано</td></tr>
</table>

9. Рекомендована література

1. H. Gould, Jan Tobochnik, W. Christian, An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems, Pearson Addison Wesley, 2007
2. C. Beisbart, N. J. Saam, Computer Simulation Validation: Fundamental Concepts, Methodological Frameworks, and Philosophical Perspectives, Springer, 2019
3. J. Lenhard, Calculated Surprises: A Philosophy of Computer Simulation, Oxford University Press, 2019
4. F. Neelamkavil, Computer Simulation and Modelling, Wiley, 1987
5. C.R.A. Catlow, Computer Modeling in Inorganic Crystallography, Elsevier, 1997
6. A. L. Garcia, Numerical Methods for Physics, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015
7. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 2007