

Державний вищий навчальний заклад  
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

Проректор \_\_\_\_\_  
"15" \_\_\_\_\_ 2016 р.

ЗАТВЕРДЖУЮ



## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### Комп'ютерне моделювання фізичних процесів

(шифр і назва навчальної дисципліни)

галузь знань \_\_\_\_\_ 10 природничі науки \_\_\_\_\_  
(шифр і назва напрямку підготовки)  
спеціальність \_\_\_\_\_ 104 фізика та астрономія \_\_\_\_\_  
(шифр і назва спеціальності)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(назва спеціалізації)  
факультет \_\_\_\_\_ фізико-технічний \_\_\_\_\_  
(назва інституту, факультету)

Робоча програма “Комп’ютерне моделювання фізичних процесів”  
(назва навчальної дисципліни)  
для студентів за спеціальністю \_\_\_\_\_ 104 фізика та астрономія \_\_\_\_\_  
„ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_, 20\_\_ р. – \_\_ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)  
Салій Ярослав Петрович професор кафедри фізики і хімії твердого тіла, доктор  
фізико - математичних наук, професор.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри Фізики і хімії твердого тіла

Протокол від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2016 р. № \_\_\_\_\_

Завідувач кафедри Фізики і хімії твердого тіла

\_\_\_\_\_ ( Прокопів В.В. )  
(підпис) (прізвище та ініціали)

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2016 р.

Схвалено методичною комісією факультету, інституту.

Протокол від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р. № \_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Голова \_\_\_\_\_ ( \_\_\_\_\_ )  
(підпис) (прізвище та ініціали)

1. Ó Салій Я.П., 2016 рік
2. Ó ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», 2016 рік

### 3. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 6.0	Галузь знань: <u>10 природничі науки</u> (шифр і назва)	Нормативна (за вибором)	
Модулів – 1	Спеціальність: <u>104 фізика та астрономія</u>	<b>Рік підготовки:</b>	
Змістових модулів – 2		1-й	-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання _____ (назва)		<b>Семестр</b>	
Загальна кількість годин -180		1-й	-й
Тижневих годин для денної форми навчання:  аудиторних 3 самостійної роботи студента 6	Освітньо-кваліфікаційний рівень: <u>магістр</u>	<b>Лекції</b>	
		22 год.	год.
		<b>Практичні, семінарські</b>	
		38 год.	год.
		<b>Лабораторні</b>	
		год.	год.
		<b>Самостійна робота</b>	
		120 год.	год.
<b>Індивідуальні завдання:</b> __ год.			
Вид контролю: контрольна робота, екзамен			

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить:

для денної форми навчання – 0,5

для заочної форми навчання –

## 2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: ознайомити студентів з основними поняттями і законами комп'ютерного моделювання фізичних процесів та їх застосуванням.

Завдання: навчити студента застосовувати закони комп'ютерного моделювання фізичних процесів до природних систем.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен **знати:** основні поняття програмування, метод дотичних Ейлера, метод Ейлера - Крамера розв'язування рівнянь руху, принцип суперпозиції, Фур'є перетворення, закони молекулярної динаміки, закони електричних і магнітних полів, ісельне розв'язування рівняння Пуассона, метод релаксації, принцип Ферма, функції, що характеризують перколяцію, якісні характеристики квадратичного відображення, класичні методи чисельного інтегрування метод випадкового блукання Метрополіса, кліткові автомати

**вміти:** використовувати набуті знання для розрахунку характеристики процесів і явищ, враховува їх особливості; розуміти фізичні принципи явищ; враховувати симетрію властивостей і ефектів, розраховувати та аналізувати, виходячи як з основних положень комп'ютерного моделювання, так і з емпіричних експериментальних даних; використовуючи для цього сучасне програмне забезпечення.

## 3. Програма навчальної дисципліни

### Змістовий модуль 1. Механіка і електрика

Тема 1. Значення комп'ютера у фізиці, природа чисельного моделювання. Використання комп'ютерів. Основні поняття програмування. Графічні засоби. Основні методи чисельного розв'язування звичайних диференціальних рівнянь. Точність і стійкість методу дотичних Ейлера. Розв'язування диференціального рівняння на прикладі задачі про зміну температури тіла згідно закону тепловіддачі Ньютона методом Ейлера.

Тема 2. Методи чисельного розв'язування ньютонівських рівнянь руху. Моделювання руху матеріальної точки в однорідному і неоднорідному полі сили тяжіння враховуючи вплив опору середовища. Розрахунок двовимірної траєкторії руху. Балістичні задачі. Двовимірні траєкторії, зв'язаний рух. Метод Ейлера - Крамера розв'язування рівнянь руху. Рух у центрально - симетричному полі. Перевірка законів Кеплера. Рівняння руху планет. Астрономічні одиниці. Моделювання орбіти. Розрахунок впливу лобового опору на орбіту супутника. Вплив збурень на орбіту планет. Моделювання руху двох взаємодіючих планет у полі зорі. Вплив збурень на орбіту супутників.

Тема 3. Лінійні і нелінійні коливальні системи. Розрахунок руху гармонічного осцилятора під дією сили тертя і зовнішньої періодичної сили, фазова площина. Принцип суперпозиції. Математичний маятник. Великі коливання математичного маятника. Закон збереження енергії. Моделювання руху нелінійного осцилятора з гармонічною зовнішньою силою і лінійною силою тертя. Відгук на зовнішню силу. Зв'язані осцилятори. Фур'є аналіз. Перехід до хвильового рівняння. Хвильовий рух. Суперпозиція хвиль.

Тема 4. Динаміка системи багатьох частинок. Програма молекулярної динаміки. Наближення до рівноваги розрідженого газу. Потенціал міжмолекулярної взаємодії. Чисельний алгоритм. Краєві умови. Прості властивості переносу. Коефіцієнт дифузії. Твердий стан і плавлення.

## Змістовий модуль 2. Оптика і статистика

Тема 5. Електричні коливальні системи. Моделювання фільтрів низьких і високих частот на прикладі електричного кола з опором і ємністю. Розрахувати вплив RC-ланцюжка на прямокутний імпульс. Спостереження явища резонансу в електричному коливальному контурі. Відгук RLC- ділянки. Резонансна частота. Імпеданс.

Тема 6. Статичні поля зарядів і струмів. Моделювання руху зарядженої частинки в електричному полі. Моделювання досліду Резерфорда. Розсіювання альфа-частинок. Силкові лінії електричного поля системи точкових зарядів. Розрахувати електричний потенціал однорідної зарядженої пластинки. Моделювання магнітного поля колового струму та розрахувати рух зарядженої частинки в магнітній лінзі. Силкові лінії магнітного поля. Чисельне розв'язування рівняння Лапласа. Знаходження потенціалу в прямокутній області. Розрахунок ємності концентричних квадратів. Чисельне розв'язування рівняння Пуассона для квадратної області. Метод релаксації для одержання чисельного розв'язку рівнянь Лапласа і Пуассона.

Тема 7. Хвильові явища. Моделювання хвильового процесу на прикладі лінійного ланцюжка зв'язаних осциляторів. Суперпозиція коливань і хвиль. Розрахунок швидкості поширення хвилі в лінійному ланцюжку. Фур'є - аналіз негармонічних періодичних процесів. Моделювання явищ інтерференції та дифракції хвиль на прикладі однієї, двох і системи щілин. Моделювання явища поляризації хвиль. Геометрична оптика і принцип Ферма. Моделювання явища заломлення в просторово неоднорідному середовищі.

Тема 8. Задача про перколяцію. Поріг перколяції на квадратній ґратці. Критичні показники. Ренорм група. Функції, що характеризують перколяцію, та їх якісна поведінка. Моделювання окупуючої перколяції. Дифузія у неупорядкованих середовищах. Регулярні фрактали і самоподібність. Генерування фракталів і їх фрактальна розмірність. Моделювання агрегації з обмеженням дифузії.

Тема 9. Наближення до статистичної рівноваги. Дисперсія рівноважних флуктуацій. Макроскопічна система, поняття рівноваги і ентропії. Моделі простих детермінованих нелінійних динамічних систем. Якісні характеристики квадратичного відображення. Нерухомі точки, біфуркації, стійкий атрактор, хаотичний режим.

Тема 10. Класичні методи чисельного інтегрування. Чисельне інтегрування найпростішим методом Монте - Карло. Аналіз похибки методу. Моделювання нерівномірного розподілу ймовірностей у найпростіших варіантах. Метод випадкового блукання Метрополіса для одержання нерівномірного розподілу ймовірностей. Неперервна границя, одержання

дифузійного рівняння. Моделювання дифузії молекул у газі методом випадкових блукань. Кліткові автомати як моделі самовідтворення. Гра життя.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
<b>Модуль 1</b>												
<b>Змістовий модуль 1. Механіка і електрика</b>												
Тема 1. Значення комп'ютера у фізиці, природа чисельного моделювання.	18	2	4			12						
Тема 2. Методи чисельного розв'язування ньютонівських рівнянь руху.	18	2	4			12						
Тема 3. Лінійні і нелінійні коливальні системи.	18	2	4			12						
Тема 4. Динаміка системи багатьох частинок	18	2	4			12						
Разом за змістовим модулем 1	72	8	16			48						
<b>Змістовий модуль 2. Оптика і статистика</b>												
Тема 5. Електричні коливальні системи	18	2	4			12						
Тема 6. Статичні поля зарядів і струмів.	18	2	4			12						
Тема 7. Хвильові явища.	18	2	4			12						

Тема 8. Задача про перколяцію.	18	2	4			12						
Тема 9. Наближення до статистичної рівноваги.	18	2	4			12						
Тема 10. Класичні методи чисельного інтегрування.	18	4	2			12						
Разом за змістовим модулем 2	108	14	22			72						
<b>Усього годин</b>	180	22	38			120						
<b>Модуль 2</b>												
ІНДЗ			-	-		-			-	-	-	
<b>Усього годин</b>												

### 5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Розв'язування диференціального рівняння на прикладі задачі про зміну температури тіла згідно закону тепловіддачі Ньютона методом Ейлера.	2
2	Перевірка законів Кеплера.	4
3	Моделювання руху нелінійного осцилятора з гармонічною зовнішньою силою і лінійною силою тертя.	4
4	Програма молекулярної динаміки.	4
5	Розрахувати вплив RC-ланцюжка на прямокутний імпульс.	4
6	Моделювання магнітного поля колового струму	4
7	Розрахунок швидкості поширення хвилі в лінійному ланцюжку.	4
8	Генерування фракталів	4
9	Моделі простих детермінованих нелінійних динамічних систем.	4
10	Моделювання дифузії молекул у газі методом випадкових блукань.	4

### 6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Точність і стійкість методу дотичних Ейлера.	24
2	Хвильовий рух. Суперпозиція хвиль.	24
3	Чисельне розв'язування рівняння Пуассона	24

4	Нерухомі точки, біфуркації, стійкий атрактор, хаотичний режим.	24
5	Кліткові автомати як моделі самовідтворення. Гра життя.	24

### 7. Методи навчання

Лекційні заняття, контрольні роботи, самостійна робота.

### 8. Методи контролю

Звіти за лабораторну роботу, екзамен.

### 9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Сума
Змістовий модуль №1		
T1	T2	25
12	13	

T1, T2 ... T9 – теми змістових модулів.

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий тест (екзамен)	Сума
Змістовий модуль № 2		25	
T3	T4		100
12	13		

### 10. Методичне забезпечення

1. Салій Я.П Комп'ютерне моделювання фізичних процесів Спеціальний фізичний практикум. Івано-Франківськ, Електронний варіант.
2. Салій Я.П. Курс лекцій з комп'ютерного моделювання фізичних процесів Івано-Франківськ, Електронний варіант.

### 11. Рекомендована література

#### Базова

1. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
2. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 1 – М.: Мир, 1990.
3. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т. 2 – М.: Мир, 1990.
4. Эберт К., Эдерер Х Компьютеры. Применение в химии. – М.: Мир, 1988.
5. Глушаков С.В., Сурядний А.С. Программирование на Visual Basic 6/0 – Харьков: Фолио, 2004.

#### Допоміжна

1. Харрисон У. Теория твердого тела. М., Наука, 1972.
2. Савельев И.В. Курс общей физики. М., Наука, 1979.
3. Смит Р. Полупроводники. М., Мир, 1982.