МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

Физический факультет
Кафедра высшей математики ФФ

УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ
академик РАН ________________ А. Е. Бондарь
«_07_» _10_ 2020 г.

Рабочая программа дисциплины

ОСНОВЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ

направление подготовки: **03.03.02 Физика, Курс 4, семестр 7**
направленность (профиль): **все профили**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
7	108	32	32		42				2	
Итого	**108**	**32**	**32**		**42**				**2**	
Всего 108 часов / 3 зачётные единицы, из них: - контактная работа 66 часов - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ОПК-2										

Разработчики:
к.ф.-м.н. Д. В. Качулин
к.ф.-м.н. С. В. Смирнов
к.ф.-м.н. И. С. Чеховской

Зав. кафедрой ВМ ФФ НГУ
PhD А. П. Ульянов

Ответственный за образовательную программу,
д.ф.-м.н., проф. С. В. Цыбуля

Новосибирск, 2020

Содержание

Аннотация

к рабочей программе дисциплины
«Основы вычислительной физики»
Направление: **03.03.02 Физика**
Направленность (профиль): все профили

Программа курса **«Основы вычислительной физики»** составлена в соответствии с требованиями СУОС по направлению подготовки **03.03.02 Физика**, а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой высшей математики физического факультета. Дисциплина изучается студентами четвёртого курса физического факультета.

Цель освоения дисциплины – дать студентам базовые знания, умения и навыки по методам вычислений, которые необходимы для изучения многих разделов физики и последующей научной работе выпускников.

Дисциплина нацелена на формирование общепрофессиональных компетенций:

ОПК-2 - способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать**: критерии устойчивости разностных схем и современные алгоритмы, применяемые в вычислительной математике.
- **Уметь**: решать конкретные вычислительные задачи, такие как численно находить нули функций, вычислять интегралы приближёнными методами, решать граничные и начальные задачи для дифференциальных уравнений с помощью явных и неявных разностных схем.
- **Владеть**: общими принципами применения вычислительных методов в фундаментальных разделах физики.

Курс рассчитан на один семестр. Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, дифференцированный зачёт.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: задания для самостоятельного решения.

Промежуточная аттестация: дифференцированный зачёт.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часов / **3** зачетные единицы.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Учебная дисциплина «Основы вычислительной физики» имеет своей целью дать студенту базовые знания по тем вычислительным методам, которые необходимы как для освоения физических дисциплин, читаемых на физическом факультете Новосибирского государственного университета, так и для последующей работы в качестве физика-исследователя.

Общепрофессиональная компетенция ОПК-2 - способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей.

Учебный курс «Основы вычислительной физики» читается классическим способом: проводятся потоковые лекции, а также практические занятия по группам, в каждой из которых не более 15-и студентов. Все практические занятия проводятся в интерактивной форме. Самостоятельная работа студентов, усвоение ими материала курса, приобретение ими базовых знаний и умений контролируются еженедельно на приёме заданий, проводимом преподавателем в устной форме с каждым студентом индивидуально.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать**:
  - критерии устойчивости разностных схем и современные алгоритмы, применяемые в вычислительной математике (ОПК 2.1).
- **Уметь**:
  - решать конкретные вычислительные задачи, такие как численно находить нули функций, вычислять интегралы приближёнными методами, решать граничные и начальные задачи для дифференциальных уравнений с помощью явных и неявных разностных схем (ОПК 2.2).
- **Владеть**:
  - общими принципами применения вычислительных методов в фундаментальных разделах физики (ОПК 2.3).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

В результате изучения дисциплины студенты физического отделения физического факультета НГУ должны усвоить основы теории вычислительных методов, а также освоить основные методы решения стандартных вычислительных задач. Кроме того, у студентов должно сформироваться умение применять вычислительные методы для решения физических задач; умение использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания по методам вычислений; умение приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии.

Для успешного освоения учебной дисциплины «Основы вычислительной физики» студенты должны обладать предварительными знаниями основ математического анализа, линейной алгебры, обыкновенных дифференциальных уравнений, функционального анализа, методов математической физики. В свою очередь учебная дисциплина «Основы вычислительной физики» предоставляет студентам теоретические знания и практические навыки, необходимые для изучения специальных дисциплин, читаемых выпускающими кафедрами.

3. **Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.**

Семестр	**Общий объем**	**Виды учебных занятий (в часах)**				**Промежуточная аттестация (в часах)**				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
7	108	32	32		42				2	
Итого	**108**	**32**	**32**		**42**				**2**	
Всего 108 часов / 3 зачётных единицы, из них: - контактная работа 66 часов - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ОПК-2										

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, дифференцированный зачёт.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- текущий контроль успеваемости: задания для самостоятельного решения;
- промежуточная аттестация: дифференцированный зачёт.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- практические занятия – 32 часа;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 42 часа;
- промежуточная аттестация (дифференцированный зачёт) – 2 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, дифференцированный зачёт) составляет 66 часов.

Работа с обучающимися в интерактивных формах составляет 32 часа (практические занятия).

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы, 108 академических часов.

№ п/п	**Раздел дисциплины**	**Неделя семестра**	**Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)**					**Консультации перед экзаменом (часов)**	**Промежуточная аттестация (в часах)**
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	Сам. работа во время промежуточной аттестации		
				Лекции	Практические занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	Представление чисел в ЭВМ	1	6	2	4	2			
2.	Решение конечных уравнений	2	6	2	4	2			
3.	Вычисление интегралов	3	6	2	6	2			.
4.	Интерполяция и аппроксимация	4	6	2	2	2			
5.	Решение обыкновенных дифференциальных уравнений	5-6	14	4	6	6			
6.	Решение задач линейной алгебры	7	7	2	4	3			
7.	Решение задачи Коши для уравнения диффузии	8-9	16	4	4	8			
8.	Дискретное преобразование Фурье	10-11	12	4	2	4			
9.	Нелинейное уравнение Шредингера	12	7	2		3			
10.	Решение нелинейных операторных уравнений	13	6	2		2			
11.	Уравнение переноса	14	7	2		3			
12.	Метод Бубнова-Галеркина. Метод конечных элементов.	15	7	2		3			
13.	Генерация последовательности случайных чисел.	16	6	2		2			
14.	Дифференцированный зачёт		2						2
Всего			**108**	**32**	**32**	**42**			**2**

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

1. Представление чисел в ЭВМ (2 часа)

Двоичная арифметика, представление чисел с плавающей точкой, точность вычислений.

2. Решение конечных уравнений (2 часа)

Решение уравнений $f(x)=0$. Методы деления пополам, простых итераций, Ньютона. Скорость сходимости. Многомерный метод Ньютона. Вычисление нулей комплексных функций.

3. Вычисление интегралов (2 часа)

Вычисление интегралов. Методы прямоугольников, трапеций. Формула Симпсона. Оценка ошибки для этих методов. Несобственные интегралы.

4. Интерполяция и аппроксимация (2 часа)

Интерполяционный полином в форме Лагранжа и Ньютона. Точность интерполяции. Первые и вторые производные функции, заданной на сетке. Интерполяция кубическими сплайнами.

5. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений (4 часа)

Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод Эйлера. Метод Рунге-Кутта второго порядка точности. Многошаговые методы. Критерии устойчивости. Жесткие уравнения.

6. Решение задач линейной алгебры (2 часа)

Метод Гаусса решения систем линейных алгебраических уравнений. Трехдиагональные матрицы. Прогонка. Представление о численных методах решения задачи на собственные значения. Степенной метод. Обратные итерации.

7. Решение задачи Коши для уравнения диффузии (4 часа)

Задача Коши для одномерного уравнения диффузии на отрезке. Аппроксимация граничных условий Дирихле и Неймана. Схемы явные, неявные и Кранка-Николсона. Точность аппроксимации. Критерий устойчивости. Задача Коши для многомерного уравнения диффузии. Схемы явные и неявные. Схема расщепления. Локально одномерный метод. Метод установления для уравнения Пуассона.

8. Дискретное преобразование Фурье (4 часа)

Дискретное преобразование Фурье. Алиасинг, эффект частокола, Окно Ханна. Алгоритм быстрого преобразования Фурье. Пакет программ FFTW.

9. Нелинейное уравнение Шредингера (2 часа)

Задача Коши для нелинейного уравнения Шредингера. Схема расщепления по физическим факторам.

10. Решение нелинейных операторных уравнений (2 часа)

Решение нелинейных операторных уравнений $\hat{L}\varphi=0$. Методы стрельбы, Ньютона-Рафсона-Канторовича. Метод инвариантного погружения.

11. Уравнение переноса (2 часа)

Численное решение уравнения переноса. Критерий устойчивости Куранта. Уравнение Хопфа. Построение устойчивой схемы, сохраняющей квадратичный интеграл движения.

12. Метод Бубнова-Галеркина. Метод конечных элементов (2 часа)

13. Генерация последовательности случайных чисел (2 часа)

Программа практических занятий (32 часа)

1. Представление чисел с плавающей точкой (4 часа).
2. Итерационные методы решения уравнений (4 часа).
3. Интегрирование функций. Вычисление интегралов методами трапеций и Симпсона (4 часа).
4. Интегрирование и дифференцирование функций. Вычисление функций Бесселя (2 часа).
5. Полиномиальная интерполяция (2 часа).

6. Решение задачи Коши для ОДУ методом Эйлера первого порядка и методом Рунге-Кутты второго порядка (2 часа).
7. Решение системы уравнений хищник-жертва методом Рунге-Кутты второго порядка (2 часа).
8. Решение жесткой системы ОДУ явной и неявной схемами Эйлера (2 часа).
9. Метод прогонки для решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональными матрицами (2 часа).
10. Решение задачи Коши для уравнения диффузии по схеме Кранка-Николсон (4 часа).
11. Метод обратных итераций для вычисления собственных значений (2 часа).
12. Дискретное преобразование Фурье синусоиды. Окно Ханна (2 часа).

Самостоятельная работа студентов (42 часа)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	16
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	6
Подготовка к контрольным работам	2
Подготовка к сдаче заданий	16
Подготовка к дифференцированному зачёту	2

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

1. С.В. Смирнов. Основы вычислительной физики. Часть 1. НГУ, 2015. URL: http://e-lib.nsu.ru/dsweb/Get/Resource-1193/page00000.pdf. ISBN 978-5-4437-0429-6.
2. С.В. Смирнов. Основы вычислительной физики. Часть 2. НГУ, 2017. URL: http://e-lib.nsu.ru/dsweb/Get/Resource-2835/page001.pdf. ISBN 978-5-4437-0676-4. ISBN 978-5-4437-0677-1.

5.2. Дополнительная литература

3. Н.Н. Калиткин. Численные методы: учебное пособие для студентов высших учебных заведений; под ред. А.А. Самарского. Москва: Наука, 1978. 512 с. или под ред. А.А. Самарского. 2-е изд., [испр.]. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2014. 586 с. ISBN 978-5-9775-0500-0.
4. А.А. Самарский, Введение в численные методы: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Прикладная математика"; Изд. 2-е, перераб. и доп. Москва: Наука, 1987. 286 с.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

5. С.В. Смирнов. Основы вычислительной физики. Часть 1. НГУ, 2015. URL: http://e-lib.nsu.ru/dsweb/Get/Resource-1193/page00000.pdf. ISBN 978-5-4437-0429-6.
6. С.В. Смирнов. Основы вычислительной физики. Часть 2. НГУ, 2017. URL: http://e-lib.nsu.ru/dsweb/Get/Resource-2835/page001.pdf. ISBN 978-5-4437-0676-4. ISBN 978-5-4437-0677-1.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:
- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

1) Текущий контроль успеваемости обучающегося происходит в течение всего семестра. В процессе приема задач, заполнения ведомостей контрольных недель и приема курсовой задачи преподаватель практических занятий выставляет оценки, отражающие уровень квалификации студента и его готовность к научно-исследовательской работе в области вычислительной физики. Оценивается
- самостоятельность работы студента;
- критическое отношение к результатам, выдаваемым компьютерной программой, и навыки их верификации;
- знание и понимание используемых численных методов, их достоинств, недостатков и ограничений; умение оценивать точность получаемых численных результатов;
- способность реализации численных методов в простом, понятном и надежном программном коде, обеспечивающем простоту изменения параметров.

2) Текущий контроль успеваемости студента предусматривает, в том числе, несколько видов контроля, результаты которых в дальнейшем учитываются также при промежуточной аттестации:
- сдача 12 задач, оформленных в соответствии с требованиями и в установленные преподавателем сроки (с 1 по 16 недели семестра); качество решения и выполнение требований по срокам сдачи задач учитываются при промежуточной аттестации; количество и срок сдачи заданий для студента может быть скорректирован по согласованию с преподавателем при наличии уважительной причины (болезнь и т.п.).
- сдача курсового задания, по теме, самостоятельно сформулированной обучающимся или выбранной им из списка предложенных преподавателем тем и согласованной с преподавателем в срок до 1 декабря.

3) Задача считается сданной, только когда студент ответил на все вопросы преподавателя. Типичный список рекомендуемых вопросов по всем задачам включает вопросы о достоинствах и недостатках используемых численных методов, наличии альтернативных подходов к решению задачи; вопросы на понимание области применимости используемых методов и наглядной демонстрации модификации параметров, которые делают программу неработоспособной.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ОПК-2 сформирована не ниже порогового уровня. Вывод об уровне сформированности компетенции принимается преподавателем.

4) Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в рамках 17 недели семестра в виде дифференцированного зачета.

5) На промежуточной аттестации студенту необходимо ответить на билет, включающий два теоретических вопроса по программе курса.

6) Обучающимся, сдавшим к моменту проведения промежуточной аттестации менее 9 задач из заданий семестра, предоставляется попытка сдать оставшиеся задания в течение первого часа

проведения промежуточной аттестации. Для получения удовлетворительной оценки по блоку задач и по промежуточной аттестации в целом количество сданных заданий должно быть не менее 9. В противном случае обучающийся получает оценку "неудовлетворительно" и не приступает к ответу на теоретические вопросы.

7) Обучающиеся, выполнившие требования по числу сданных задач до начала промежуточной аттестации или непосредственно в ходе нее, приступают к ответу на вопросы билета.

8) При подготовке ответов на вопросы билета обучающимся запрещено:
- использовать учебную литературу, в т.ч. учебники, пособия, справочники, конспекты, шпаргалки и т.п.;
использовать электронные устройства, в т.ч. ноутбук, планшет, смартфон, мобильный телефон и т.п.;
- использовать подсказки других обучающихся;
- выходить из аудитории во время подготовки к ответам на вопросы из экзаменационного билета.
Обучающийся, нарушивший эти условия, удаляется с зачета, и ему проставляется оценка «неудовлетворительно».

9) Для подготовки к ответам на вопросы экзаменационного билета студенту дается один час.

10) Итоговая оценка по дисциплине выставляется преподавателем как среднее из оценок за работу в течение семестра, сдачу курсовой работы и ответы на теоретические вопросы.

11) Когда результат усреднения оказывается пограничным между двумя оценками, обучающемуся может быть предложено выполнить дополнительное задание. Примеры задач на оценки "удовлетворительно", на "хорошо" и на "отлично" приведены в п. 5.4 настоящего приложения.

12) На самостоятельное решение задач выделяется четыре академических часа. При решении задач, обучающимся разрешается
- использовать учебную литературу, в т.ч. учебники, пособия, справочники, конспекты и т.п.;
- использовать ноутбук для написания и отладки программного кода;
но запрещается
- использовать другие электронные устройства: планшет, смартфон, мобильный телефон и т.п.;
- использовать подсказки других обучающихся;
- выходить из аудитории во время решения задачи.
Обучающийся, нарушивший эти условия, удаляется с дифференцированного зачёта, и ему проставляется меньшая из пограничных оценок.

13) По истечении четырех академических часов с момента получения задачи, обучающиеся в устной форме, сдают задачу преподавателю. При неверном решении задачи промежуточная аттестация прекращается. В этом случае обучающимся проставляется меньшая из пограничных оценок. В случае успешного решения задачи, обучающимся проставляется большая из пограничных оценок.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы вычислительной физики».

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ОПК 2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/ несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ОПК 2.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ОПК 2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Задачи для самостоятельного решения

Машинным ε называется такое число, что $1+\varepsilon/2=1$, но $1+\varepsilon\neq 1$. (Также часто используется обозначение ULP – *unit in the last place*, или *unit of least precision*, единица в младшем разряде.) Найти машинное ε, число разрядов в мантиссе, максимальную и минимальную степени, при вычислениях с обычной и двойной точностью. Сравнить друг с другом четыре числа: 1, $1+\frac{\varepsilon}{2}$, $1+\varepsilon$ и $1+\varepsilon+\frac{\varepsilon}{2}$, объяснить результат.

Задача 2

Используя методы дихотомии, простых итераций и Ньютона, найти уровень энергии E основного состояния квантовой частицы в прямоугольной потенциальной яме

$$-\frac{1}{2}\psi''(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x), \qquad U(x)=\begin{cases} -U_0, & |x|\le a, \\ 0, & |x|>a. \end{cases}$$

Задача 3

Вычислить интегралы

$$I_{3a}=\int\limits_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}x}{1+x^2}, \qquad I_{3b}=\int\limits_{0}^{1}x^{\frac{1}{3}}e^{\sin x}dx$$

методами трапеций и Симпсона, разделив отрезок интегрирования на $4, 8, 16, \dots$ интервалов. Как убывает погрешность численного интегрирования с ростом числа интервалов?

Задача 4

Используя интегральное представление для функций Бесселя целого индекса m:

$$J_m(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\cos(mt-x\sin t)dt$$

и вычисляя производную с помощью конечной разности в тех же точках, что и сам интеграл, продемонстрировать выполнение равенства

$$J_0'(x)+J_1(x)=0$$

с точностью не хуже 10^{-10} на отрезке $x\in[0,2\pi]$.

Задача 5

Провести интерполяционный полином $P_n(x)$ через точки

$$x_k=1+\frac{k}{n}, \quad y_k=\ln x_k, \qquad k=0,\dots,n.$$

при $n=4,\dots,15$. Нарисовать графики $P_n(x)-\ln(x)$.

Задача 6

Решить задачу Коши

$$\frac{dx}{dt} = -x\,,\ \ x(0) = 1\,,\ \ 0 < t < 3$$

методом Эйлера первого порядка точности и методами Рунге-Кутты второго и четвертого порядка точности.

Задача 7

Решить систему уравнений хищник-жертва

$$\begin{cases} \dot{x} = a\,x - b\,xy \\ \dot{y} = c\,xy - d\,y \end{cases}$$

методом Рунге-Кутты второго порядка точности при $a = 10, \quad b = 2, \quad c = 2, \quad d = 10.$ Нарисовать фазовую траекторию.

Задача 8

Решить жесткую систему уравнений по явной и неявной схемам Эйлера

$$\begin{cases} u' = 998\,u + 1998\,v \\ v' = -999\,u - 1999\,v \end{cases}.$$

Задача 9

Методом прогонки решить разностный аналог граничной задачи для уравнения $y'' = \sin x$ на промежутке $0 < x < \pi$. Рассмотреть различные варианты граничных условий.

Задача 10

Решить задачу Коши для одномерного уравнения диффузии по схеме Кранка-Николсон

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad L = 1$$

$$u(0,t) = 0,\ u(L,t) = 0, \quad u(x,0) = x(1 - x/L)^2,$$

На каждом шаге по времени найти максимальное значение температуры и нарисовать зависимость максимальной температуры от времени. Показать, что на больших временах она убывает экспоненциально.

Задача 11

Найти уровень энергии и волновую функцию $\psi(x)$ основного состояния в потенциальной яме $U(x)$, решая конечномерный аналог спектральной задачи для одномерного стационарного уравнения Шрёдингера

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) - E\right)\psi(x,t) = 0, \qquad |\psi(x)| \to 0 \quad \text{при} \quad |x| \to \infty.$$

Для поиска наименьшего собственного значения $\hat{H}\vec{\psi} = E_0\vec{\psi}$ трёхдиагональной матрицы $\hat{H}$ использовать метод обратных итераций. Проверить работу программы, сравнив с точным решением для $U(x) = \frac{1}{2}x^2$.

Задача 12

Сигнал, состоящий из двух гармонических осцилляций с различными частотами и амплитудами, $f(t) = a_0 \sin \omega_0 t + a_1 \sin \omega_1 t$ регистрируется на некотором интервале T. Вычислить и построить график спектра мощности. Сравнить спектры, полученные с прямоугольным окном и окном Ханна, при следующих параметрах: $a_0 = 1$, $a_1 = 0.002$, $\omega_0 = 5.1$, $\omega_1 = 5\omega_0 = 25.5$, $T = 2\pi$.

Варианты курсовых работ

Вариант 1

Решить задачу Коши для одномерного уравнения диффузии по схеме Кранка-Николсон

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x), \quad 0 < x < L, \quad L = 1$$
$$u(0,t) = 0,\ u(L,t) = 0,\ u(x,0) = 0,\ f(x) = x(1 - x/L)^2.$$

На каждом шаге по времени найти максимальное значение температуры и положение максимума, построить график зависимости указанных величин от времени. Модифицировать программу, заменив граничное условие в точке L на условие теплоизоляции $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ и построить аналогичные графики. Что будет, если обе границы теплоизолированы?

Вариант 2

Решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по явной схеме. Производную по координате заменить на разностное отношение и полученную систему ОДУ по времени решить методом Рунге-Кутты второго порядка точности

$$i\frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10$$
$$A(-L,t) = A(L,t) = 0, \quad A(x,0) = c\lambda/\cosh(\lambda x)$$

При любом λ и $c = 1$ $|A|$ не должен зависить от времени. При $\lambda = 1$ попробуйте поменять c. Нарисовать поверхность $|A(x,t)|$.

Вариант 3

Используя пакет FFTW, решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по схеме расщепления

$$i\frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10$$
$$A(-L,t) = A(L,t), \quad A(x,0) = c\lambda/\cosh(\lambda x)$$

При любом λ и $c = 1$ $|A|$ не должен зависить от времени. При $\lambda = 2$ попробуйте поменять c. Нарисовать поверхность $|A(x,t)|$.

Вариант 4

Решая задачу Коши

$$\frac{\partial u}{\partial t} = g\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1,$$
$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad u(x,0) = f(x) = x(1-x)$$

по неявной схеме, найти максимальное собственное значение оператора $\hat{L} = g\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ при $g = 0.5$ и $g = 1$. Как зависит ответ от выбора $f(x)$?

Вариант 5

Используя метод установления и локально одномерный метод, найти стационарное распределение температуры в двумерной квадратной области в задаче с источником тепла

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x,y)$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L,y,t) = u(L,y,t) = u(x,-L,t) = u(u,L,t) = 0, \quad L = 1.$$

Интенсивность источника $f(x,y) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2)$. Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что она перестала меняться и нарисовать двумерное распределение температуры.

Вариант 6

Используя метод установления и локально одномерный метод, найти стационарное распределение температуры в двумерной квадратной области в задаче с ненулевой температурой на границе:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\,,$$
$$u(-L,y,t) = u(L,y,t) = (1 - y^2/L^2)\,, \quad u(x,-L,t) = u(x,L,t) = (1 - x^2/L^2), \quad L = 1.$$

Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что она перестала меняться в процессе установления решения и нарисовать двумерное распределение температуры.

Вариант 7

Используя локально одномерный метод, решить задачу Коши для уравнения теплопроводности в двумерной квадратной области

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L,y,t) = u(L,y,t) = u(x,-L,t) = u(x,L,t) = 0, \quad L = 1,$$

а начальное распределение температуры $u(x,y,0) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2)$. Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что закон спадания на больших временах имеет экспоненциальный характер. Определить показатель экспоненты.

Вариант 8

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с источником тепла и анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x, y, t)$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1.$$

Интенсивность источника

$$f(x, y) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2) + (y/L + 1)(1 - y^2/L^2)\sin(\omega t), \quad \omega = 2\pi.$$

Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата.

Вариант 9

Решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по схеме расщепления

$$i\frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10,$$

$$A(-L, t) = A(L, t), \quad A(x, 0) = c\lambda/\cosh(\lambda x).$$

При любом λ и $c = 1$ решение $|A(x, t)|$ не должно зависеть от времени. Исследовать численное решение при $\lambda = 2$ для различных c. Нарисовать поверхность $|A(x, t)|$. Фурье-образ вычислять с помощью пакета FFTW.

Вариант 10

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = \sin 2\pi t, \quad u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1.$$

Вариант 11

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\,.$$

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = \sin 2\pi t$$

Стенки $u(x, -L, t)$ и $u(x, L, t)$ теплоизолированы. $L = 1$.

Вариант 12

Найти уровень энергии и волновую функцию $\psi(x)$ основного состояния в симметричной яме $U(-x) = U(x)$, интегрируя одномерное стационарное уравнение Шрёдингера

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) - E\right)\psi(x,t) = 0, \qquad |\psi(x)| \to 0 \quad \text{при} \quad x \to 0$$

по x от 0 до некоторого x_{max} для различных E. Интегрирование по x вести методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности. Проверить работу программы в нескольких частных случаях, для которых легко выписывается аналитическое решение спектральной задачи.

Вариант 13

Используя метод вращений Якоби для решения конечномерного аналога спектральной задачи для одномерного стационарного уравнения Шрёдингера, найти уровни энергии и волновые функции $\psi_k(x)$ основного и первых 20 возбуждённых состояний гармонического осциллятора. Сравнивая численный ответ с точным решением, оценить погрешность ответа в зависимости от количества k нулей волновой функции $\psi_k(x)$.

Вариант 14

Решить задачу Коши для уравнения Хопфа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad -5 < x < 10,$$

$$u(x,0) = \exp(-x^2/2), \quad 0 < t < t_{\max} = 1.$$

Вычислить максимальную невязку с точным решением. Сравнить результаты, полученные при использовании двух различных численных схем.

Вариант 15

Используя метод установления, найти стационарное распределение температуры в кольце, ограниченном двумя концентрическими окружностями с радиусами a и b, если температура на внутренней границе поддерживается равной $f(\varphi)$, а на внешней границе – $g(\varphi)$. Исследовать несколько частных случаев (в т.ч. с нетривиальной зависимостью от φ), для которых легко выписать аналитическое решение.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \triangle u = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}, \quad u(a,\varphi) = f(\varphi), \quad u(b,\varphi) = g(\varphi)$$

Вариант 16*

Используя метод установления, найти стационарное распределение температуры в круге радиуса R, если температура на границе поддерживается равной $T(\varphi)$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \triangle u = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}, \quad u(R,\varphi) = T(\varphi) = \sum_{m=-l}^{+l} T_m(\varphi)e^{im\varphi}.$$

Указание. Искать решение в виде

$$u(r,\varphi,t)=\sum_{m=-l}^{+l}u_m(r,t)e^{im\varphi},$$

выделить в $u_m(r,t)$ асимптотики в нуле $u_m(r,t)=r^m f_m(r,t)$, получить и интегрировать уравнения на $f_m(r,t)$. Для разложения в ряд Фурье использовать пакет FFTW. Исследовать несколько частных случаев (в т.ч. с нетривиальной зависимостью от φ), для которых легко выписать аналитическое решение.

Вариант 17*

Решить задачу Коши для нестационарного одномерного уравнения Шрёдингера

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-U(x)\right)\psi(x,t)=0$$

по явной схеме. Производную по координате заменить на разностное отношение и полученную систему ОДУ по времени проинтегрировать методом Рунге-Кутты второго порядка точности. Построить решение $\psi(x,t)$ и Фурье-образ скалярного произведения $P(t)=<\psi(x,t)|\psi(x,0)>$. Рассмотреть случай линейного осциллятора. В чём физический смысл $|P(\omega)|^2$?

Требования к программе: предусмотреть возможность замены потенциала $U(x)$ и начальных условий $\psi(x,0)$. Фурье-образ вычислять с помощью пакета FFTW.

Список вопросов при проведении промежуточной аттестации

1. Представление вещественных чисел, которое используется в компьютерах.
2. Количество разрядов для чисел с плавающей точкой одинарной и двойной точности. Точность, с которой проводятся вычисления.
3. Как правильно проверять равенство двух чисел с плавающей точкой?
4. Корни нелинейного уравнения. Постановка задачи для метода простых итераций, метода Ньютона и метода деления пополам.
5. Корни нелинейного уравнения: метод простых итераций. Условие сходимости, формула из которой оно получается.
6. Корни нелинейного уравнения: метод деления пополам. Как работает, сколько может потребоваться итераций.
7. Корни нелинейного уравнения: метод Ньютона. Формула и поясняющий рисунок.
8. Интегрирование. Получить формулу Симпсона. Численное интегрирование. Что такое порядок точности метода? Порядок формул трапеций и Симпсона.
9. Численное интегрирование. Как проверить, что реализация метода в программе имеет правильный порядок точности?

10. Численное интегрирование. Алгебраический порядок метода и асимптотика погрешности. Может ли апостериорная оценка погрешности давать дробный порядок метода?

11. Численное интегрирование. Что делать с особенностью внутри интервала интегрирования или на его краях.

12. Численное интегрирование. Как вычислить интеграл с бесконечным пределом.

13. Чем различаются интерполяция, экстраполяция и аппроксимация?

14. Математическая постановка задачи построения интерполяционного полинома.

15. Интерполяционный полином в форме Лагранжа.

16. Интерполяционный полином в форме Ньютона. Способ построения (для произвольного набора точек). Чем он удобен.

17. Интерполяционный полином. Пример гладкой функции, для которой его бессмысленно строить.

18. ОДУ. Что такое порядок метода. Отличие от точного решения на одном шаге и при интегрировании на отрезке.

19. ОДУ. Метод Эйлера. Формула и поясняющий рисунок.

20. ОДУ. Метод Эйлера. Порядок метода: вывести формулу.

21. ОДУ. Метод Рунге-Кутты второго порядка. Формула (частные случаи) и поясняющие рисунки, порядок метода.

22. ОДУ. Метод Адамса-Башфорта. Как строится, формула для метода второго порядка.

23. ОДУ. Метод Адамса-Башфорта. Каким методом делать первый шаг.

24. ОДУ. Неустойчивость: как проявляется, условие, когда возникает.

25. ОДУ. Какой метод самый употребительный?

26. Решение системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей. Прогонка: как получить формулы.

27. Уравнения в частных производных. Порядок метода. Как его проверить?

28. Уравнения в частных производных. Как строится разностная схема (на примере уравнения теплопроводности).

29. Уравнение теплопроводности. Явная схема: формулы и порядок.

30. Уравнение теплопроводности. Неявная схема: формулы и порядок. Уравнение теплопроводности. Схема Кранка-Николсона: формулы и порядок.

31. Уравнение теплопроводности. Явная схема: устойчивость (условие, как его получить).

32. Уравнение теплопроводности. Устойчивость неявных схем.

33. Уравнение теплопроводности. Задача Неймана. Формула второго порядка точности для граничных условий.

34. ОДУ. Решение краевой задачи для неоднородного уравнения второго порядка.

35. Чем хороша локально одномерная схема расщепления для уравнения теплопроводности?

36. Решение нелинейных операторных уравнений методом Ньютона-Рафсона-Канторовича.

37. Решение операторных уравнений методом инвариантного погружения.

38. Численные схемы для одномерного уравнения переноса.

39. Критерий устойчивости Куранта-Фридрихса-Леви.

40. Схема расщепления для нелинейного уравнения Шредингера

41. Что такое дискретное преобразование Фурье?

42. Частота Найквиста. Шаг по частоте в спектре.

43. Сколько независимых спектральных компонент у комплексного сигнала длины N?

44. Эффект частокола и окно Ханна.

45. Метод Галеркина. Как выглядят базисные функции в методе конечных элементов?

Примеры задач при проведении промежуточной аттестации

Задача на оценку "удовлетворительно"

Найти решение $\phi(x)$ краевой задачи

$$\begin{gathered}\phi'' = \phi - 2\cos(x), \quad 0 < x < \pi \\ \phi(0) = 0, \quad \phi(\pi) = -(1 + e^{-\pi})\end{gathered}$$

методом стрельбы. Использовать метод Рунге-Кутта второго порядка точности.

Задача на оценку "хорошо"

Найти решение уравнения Риккати

$$y' - y^2 = \cos(x)$$

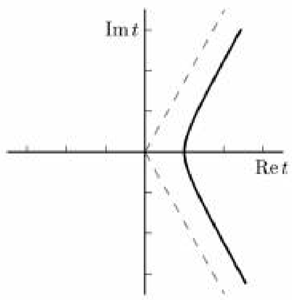
На отрезке $[0, 2\pi]$ удовлетворяющее условию $y(0) + y(2\pi) = 0$. Построить график решения, найти значения $y(0), y(2\pi)$ с абсолютной погрешностью не более 10^{-8} и временем вычислений не более 5 секунд.

Задача на оценку "отлично"

Интегральное представление функции Эйри имеет вид:

$$Ai(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \exp\left(\frac{t^3}{3} - zt\right) dt \qquad (1)$$

где $i^2 = -1$, а контур интегрирования C в комплексной плоскости приходит из бесконечности под углом $-\frac{\pi}{3}$ и уходит на бесконечность под углом $\frac{\pi}{3}$ (см. рисунок).



Написать программу для вычисления второго нуля функции $Ai(x)$ с использованием интегрального представления (1) с точностью не менее 10 знаков после запятой.

Примеры билетов на экзамен

Билет № 1

1. Численное интегрирование. Что такое порядок точности метода. Порядок формул трапеций и Симпсона.

2. Численное интегрирование ОДУ. Методы Эйлера явный и неявный: формулы и поясняющие рисунки.

Билет № 2

1. Корни нелинейного уравнения: метод деления пополам. Как работает, сколько может потребоваться итераций.
2. Численное интегрирование систем ОДУ. Неустойчивость: как проявляется, условие, когда возникает.

Билет № 3

1. Чем различаются интерполяция, экстраполяция и аппроксимация.
2. Одномерное уравнение теплопроводности. Явная и неявная схемы: формулы и порядок.

Билет № 4

1. Интерполяционные полиномы Лагранжа.
2. Частота Найквиста. Шаг по частоте в спектре.

Билет № 5

1. Эффект частокола и окно Ханна.
2. Алгоритм нахождения обратной матрицы за $O(N^3)$ операций.

Билет № 6

1. Решение системы линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей. Как получить формулы?
2. Численное интегрирование. Алгебраический порядок метода и асимптотика погрешности. Может ли апостериорная оценка погрешности давать дробный порядок метода?

Билет № 7

1. Как правильно проверять равенство двух чисел с плавающей точкой.
2. Численное интегрирование. Как вычислить интеграл с бесконечным пределом.

Билет № 8

1. Корни нелинейного уравнения: метод Ньютона. Формула и поясняющий рисунок.
2. Численное интегрирование ОДУ. Метод Адамса-Башфорта: идея метода.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Основы вычислительной физики»
по направлению подготовки 03.03.02 Физика
Профиль: все профили

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного