

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра нанофізики конденсованих середовищ



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Комп'ютерне моделювання в природничих науках

(повна назва дисципліни)

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки (шифр і назва)
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали (шифр і назва спеціальності)
освітній рівень	магістр (молодший бакалавр, бакалавр, магістр)
освітня програма	Високі технології (прикладна фізика та наноматеріали) (назва освітньої програми)
вид дисципліни	<u>обов'язкова</u>

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	4
Кількість кредитів ECTS	3.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: Русінчук Наталя Миколаївна, асистент кафедри нанофізики конденсованих середовищ

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

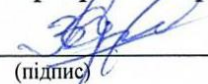
КИЇВ – 2021

Розробники:

Ільченко Володимир Васильович, професор, кафедра нанофізики конденсованих середовищ
Русінчук Наталя Миколаївна, асистент, кафедра нанофізики конденсованих середовищ

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри нанофізики конденсованих середовищ


_____ (Скришевський В.А.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

Протокол № 7 від «25» 02 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «05» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії 
_____ (Русінчук Н.М.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з відомими числовими алгоритмами для розв'язання фізичних, біологічних та хімічних задач та оволодіння підходами до моделювання процесів у природі, навичками використання сучасних типових числових методів та сучасних програмних середовищ.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):

1. Знати основні поняття теорії моделювання, приклади динамічних та випадкових процесів у природничих науках.
2. Вміти записати диференційне рівняння, що описує поведінку динамічної системи, розв'язати аналітично диференційне рівняння.
3. Володіти елементарними навичками складання алгоритмів та написання програм для реалізації обчислень.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Предметом навчальної дисципліни є числові моделі фізичних процесів, алгоритми та методи моделювання фізичних явищ.

В курсі детально розглядаються найбільш поширені підходи до проведення моделювання: використання сіткових методів та кінцевих різницевих схем до розв'язання диференційних рівнянь; числове моделювання фізичних процесів, що описуються рівняннями математичної фізики та застосування частинкових та імовірнісних методів до розв'язання рівнянь математичної фізики та їх використання для опису досить складних модельних об'єктів, що можуть бути описані лише за допомогою числових комп'ютерних моделей, зокрема таких об'єктів як перколяційні кластери, фрактали. Розглядаються принципи реалізації нейронних мереж та можливості їх застосування до моделювання природничих явищ.

4. Завдання (навчальні цілі):

Навчальні цілі дисципліни спрямовані на досягнення таких загальних та фахових компетентностей:

ЗК01. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК02. Здатність спілкуватися державною та іноземною мовами як усно, так і письмово.

ЗК06. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК12. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК14. Здатність зрозуміло і недвозначно доносити власні висновки, а також знання та пояснення, що їх обґрунтовують, до фахівців і нефахівців, зокрема до осіб, які навчаються.

ФК01. Здатність виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК03. Здатність аналізувати отримані результати, презентувати їх фахівцям у даній галузі, оформлювати наукові статті та науково-технічні звіти.

ФК07. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу, критичного осмислення проблем у професійній діяльності та на межі предметних галузей.

ФК10. Здатність відповідно до поставленої задачі проводити самостійно та в команді наукові дослідження фізичних систем, явищ і процесів (експериментальні, теоретичні, комп'ютерне моделювання) в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основні підходи до моделювання процесів у природничих науках, розуміти межі їх застосовності та точність, особливості побудови моделей в різних природничих науках.	Лекції, самостійна робота студента	Письмова тестова робота Опитування на лекціях	15% 5%
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для створення комп'ютерних моделей реальних об'єктів та процесів з метою дослідження їх	Лабораторні роботи	Звіти по лабораторних роботах	45%
4.1	Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору типу моделі, підходів моделювання та програмного комплексу для описання фізичних, біологічних чи хімічних процесів чи систем.	Лекції, лабораторні роботи, самостійна робота студента	Письмовий звіт з семестрової роботи та усний захист Практичні домашні завдання до лекцій	30% 5%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни		
	1.1	2.1	4.1
ПР02. Використовувати знання в галузі прикладної фізики, математики, електроніки та інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих задач.	+	+	+
ПР03. Знаходити та аналізувати наукову та науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики та наноматеріалів із вітчизняних та зарубіжних джерел, в тому числі з використанням сучасних пошукових систем.			+
ПР04. Виконувати аналіз спеціальної літератури, формулювати постановку наукової або науково-технічної задачі, обирати методи та методики, складати програми наукових досліджень та науково-технічних розробок у галузі прикладної фізики та наноматеріалів.	+		+
ПР06. 1. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.	+	+	+
ПР10. Складати описи виконаних досліджень і проєктів, що розробляються, обробки, аналізу та інтерпретації результатів досліджень, підготовки даних для складання звітів і презентацій, написання доповідей, статей та іншої науково-технічної документації.			+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Письмова тестова робота: РН 1.1 - 15 балів/10 балів.
 2. Лабораторні роботи: РН 2.1. - 45 балів/30 балів.
 3. Самостійна семестрова робота: підготовка звіту та захист: РН 4.1 - 30 балів/20 балів.
 4. Опитування під час лекцій: 5 балів/ 0 балів.
 5. Виконання домашніх практичних завдань: 5 балів/0 балів.
- Усього: 100 балів/60 балів.

- підсумкове оцінювання: відсутнє.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
Всього	60	100

7.2 Організація оцінювання:

Під час проведення інтерактивних лекцій студентам ставляться запитання, які оцінюються 1-2 бали. Протягом семестру кожен студент за правильні відповіді, дані під час лекцій, може отримати від 0 до 5 балів.

До кожної теми лекції студенти отримують домашні практичні завдання, які оцінюються в 1-3 бали, а під час наступної лекції студенти, що виконали ці завдання можуть представити свої розв'язки перед аудиторією. Протягом семестру за правильні розв'язки завдань кожен студент може отримати від 0 до 5 балів.

У кінці семестру після завершення вивчення тем на останній лекції (№10) проводиться письмова тестова робота. Контрольна робота спрямована на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр. Результати контрольної роботи студенти дізнаються у той самий день.

Протягом семестру студенти виконують лабораторні роботи, за результатами чого готують письмові та усні звіти.

Протягом семестру студенти працюють над виконанням самостійної роботи, необхідні знання та навички для виконання якої отримують під час лекційних та лабораторних занять. Результатом виконання семестрового завдання є письмовий звіт та усний захист.

Для студентів, які упродовж семестру не досягли мінімального рубіжного рівня оцінки (60 балів), для одержання заліку обов'язковим є виконання додаткових завдань.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	самостійна робота
Частина 1 Теоретичне навчання				
1	Вступ. Тема 1 Вступ. Загальні підходи до побудови комп'ютерних моделей та їх формалізації.	1		1
2	Тема 2. Різницеві похідні та точність комп'ютерного моделювання. Розв'язання диференціальних рівнянь першого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	1		1
3	Тема 3. Розв'язання диференціальних рівнянь другого порядку з заданими початковими умовами. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність.	2		2
4	Тема 4. Розв'язання крайових задач. Метод стрільби та метод скінченних різниць.	2		2
5	Тема 5. Розв'язання систем диференціальних рівнянь. Основні алгоритми, їх межі застосовності, точність. Стаціонарні стани системи. Поняття тригера.	2		2
6	Тема 6. Загальні підходи до розв'язання диференціальних рівнянь у частинних похідних. Зв'язані коливні системи. Перехід від системи рівнянь що описує зв'язані осцилятори до хвильового рівняння. Моделювання хвиль.	2		2
7	Тема 7. Фур'є аналіз. Швидке перетворення Фур'є. Вейвлет аналіз.	2		2
8	Тема 8. Поняття про метод Монте-Карло. Генератори випадкових чисел. Генерація числових послідовностей з заданим законом розподілу ймовірностей. Похибки при моделюванні методом Монте-Карло.	2		2
9	Тема 9. Системи «реакція-дифузія» в природничих науках та їх моделювання. Утворення порядку з хаосу.	2		2
10	Тема 10. Чисельне інтегрування. Розв'язання інтегральних рівнянь.	2		2
11	Тема 11. Перколяція. Фрактали. Клітинні автомати. Письмова тестова робота.	2		2
Частина 2 Лабораторний практикум				
11	Тема 12. Застосування різницевих схем до розв'язання диференціальних рівнянь в природничих науках.		2	2
12	Тема 13. Моделювання випадкових процесів. Застосування методу Монте-Карло до розв'язання практичних завдань та моделювання процесів в природничих науках.		4	4
13	Тема 14. Моделювання систем «реакція-дифузія».		4	4
14	Тема 15. Застосування комп'ютерного моделювання до описання та дослідження систем в природничих науках.			30
	ВСЬОГО	20	10	60

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – **20 год.**

Лабораторні заняття - **10 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. Harvey Gould, Jan Tobochnik, Wolfgang Christian «An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications To Physical Systems», 2006

Додаткова:

2. Martin Oliver Steinhauser «Computer Simulation in Physics and Engineering»
3. Philipp Scherer «Computational Physics: Simulation of Classical and Quantum Systems»

10. Додаткові ресурси:

1. <https://diveintopython3.problemsolving.io/>
2. <https://www.scipy.org/>
3. <https://www.sciencedirect.com/journal/journal-of-computational-physics>