

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

фізичний факультет
(назва факультету)

Кафедра фізики функціональних матеріалів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СПЕЦІАЛЬНІ МЕТОДИ ПРОГРАМУВАННЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ У ФІЗИЦІ
для студентів

галузь знань 10. Природничі науки
(шифр і назва)

спеціальність 104. Фізика та астрономія
(шифр і назва спеціальності)

освітній рівень магістр
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)

освітня програма Медична фізика
(назва освітньої програми)

спеціалізація
(за наявності) _____
(назва спеціалізації)

вид дисципліни обов'язкова (ОК 18)

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>6</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: Момот Андрій Іванович, Бур'ян Сергій Анатолійович
(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

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

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

Розробники: Момот Андрій Іванович, доктор фіз.-мат. наук, доцент кафедри фізики функціональних матеріалів

ЗАТВЕРДЖЕНО

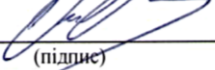
Зав. кафедри фізики функціональних матеріалів

_____ (підпис)  (Микола КУЛІШ)

Протокол № 10 від «20» травня 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії _____ (підпис)  (Олег ОЛІХ)

« _____ » _____ 20__ року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – полягає в опануванні студентами системи комп'ютерної математики Maple, а саме в отриманні навичок символічних і числових розрахунків для вирішення математичних і фізичних задач та візуального представлення отриманих результатів. Також в освоєнні засобів і методів програмування у Maple.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

- Знати основи математичного аналізу, аналітичної геометрії та лінійної алгебри, диференціальних рівнянь, математичної фізики і програмування.
- Вміти застосовувати знання з математичного аналізу, диференціальних рівнянь, лінійної алгебри для виконання математичних перетворень і розв'язування диференціальних рівнянь.
- Володіти елементарними навичками: роботи з комп'ютером, математичних перетворень, знаходження похідних та інтегралів.

3. Анотація навчальної дисципліни:

В рамках навчальної дисципліни «Спеціальні методи програмування та моделювання у фізиці» вивчаються засоби системи комп'ютерної математики Maple для символічних перетворень математичних виразів, аналітичного та числового розв'язування рівнянь та систем алгебраїчних рівнянь, задач математичного аналізу, аналітичної геометрії та лінійної алгебри, візуалізації та аналізу даних. Засоби аналітичного та числового розв'язування звичайних диференціальних рівнянь і їх систем, рівнянь у частинних похідних і візуалізації розв'язків у вигляді графіків, фазових портретів чи анімацій. Також вивчаються засоби програмування в Maple, зокрема створення власних функцій та процедур, умовний оператор, цикли, запис даних у файл та зчитування. Окрім математичних задач, отримання навичок роботи у Maple закріплюється розглядом задач із різних розділів фізики, або задач, які виникають у студентів під час виконання дипломних робіт.

4. Завдання (навчальні цілі) Студент повинен знати основні команди і функції системи комп'ютерної математики Maple та вміти створювати в Maple програми для розв'язування та аналізу аналітичним та числовими методами різного роду фізичних задач, які сформульовані у математичному вигляді. Вміти представити отримані результати у графічному вигляді.

Згідно освітньо-наукової програми дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних *компетентностей*:

загальних:

- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК1).
- Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології. (ЗК5).

спеціальних:

- Здатність аналізувати, вибирати і застосовувати чисельні та аналітичні методи для відповідних розрахунків в галузі медичної фізики. (СК12).
- Здатність аналізувати, вибирати і застосовувати програмне забезпечення для моделювання фізичних процесів, що відбуваються в людському організмі. (СК13).

5. Результати навчання за дисципліною:

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1	1.1 Знати типи даних та перетворення над ними. Складні типи виразів і команди перетворення	Лекція, практичне	Екзамен, виконання	25

	виразів системи Maple. Знати команди Maple для розв'язування задач математичного аналізу: знаходження границь і похідних, розкладання функцій у ряд, знаходження інтегралів. Знати команди для візуалізації даних, побудови графіків та створення анімацій у Maple. Знати команди Maple для розв'язування звичайних диференціальних рівнянь та їх систем. Базові засоби програмування в системі Maple. Умовні конструкції, оператори циклу.	заняття, самостійна робота	індивідуальних самостійних завдань	
	1.2 Знати методи якісного аналізу систем диференціальних рівнянь першого порядку, на прикладі систем які описують еволюцію чисельності популяцій. Знати типи стаціонарних точок. Знати команди Maple для розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	10
	1.3 Знати підходи до дослідження у Maple різного роду фізичних та математичних задач: квадратичного відображення, теплоємності молекулярного газу, моделювання випадкових процесів.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	10
2	2.1 Вміти розв'язувати алгебраїчні рівняння, нерівності та системи у Maple. Розв'язувати задачі математичного аналізу: знаходити границі і похідні, розкласти функції у ряд, знаходити інтеграли. Вміти будувати графіки та створювати анімації у Maple. Вміти розв'язувати як аналітично так і чисельно звичайні диференціальні рівняння та їх системи. Вміти застосовувати базові засоби програмування в системі Maple: умовні конструкції, оператори циклу.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Екзамен, виконання індивідуальних самостійних завдань	25
	2.2. Вміти знаходити стаціонарні точки нелінійної системи двох диференціальних рівнянь першого порядку, визначати їх тип і будувати фазовий портрет. Вміти розв'язати у Maple одномірне рівняння дифузії (теплопровідності) та хвильове рівняння, задавати початкові і крайові умовами, візуалізувати результати обчислень.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	10
	2.3 Вміти використовувати Maple для задач квантової механіки: візуалізувати орбіталі атома гідрогену, знаходити енергію основного та збудженого стану атома гідрогену на базисних функціях гауссового типу.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	10
	2.4 Вміти досліджувати у Maple різного роду фізичні та математичні задачі, зокрема квадратичне відображення, теплоємність молекулярного газу. Моделювати випадкові процеси.	Лекція, практичне заняття, самостійна робота	Виконання індивідуальних самостійних завдань	10

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни						
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	2.4
ПРН06. Обирати ефективні математичні методи та інформаційні технології та застосовувати їх для здійснення досліджень та/або інновацій в області фізики та/або астрономії.	+	+	+	+	+	+	+
ПРН13. Створювати фізичні, математичні і комп'ютерні моделі природних об'єктів та явищ, перевіряти їх адекватність, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, аналізувати обмеження.		+	+		+		+
ПРН19. Знати і вміти застосовувати чисельні та аналітичні методи для відповідних розрахунків в галузі медичної фізики.			+				+
ПРН20. Знати і вміти застосовувати програмне забезпечення для моделювання фізичних процесів, що відбуваються в людському організмі.		+			+		

7. Схема формування оцінки:

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

Виконання індивідуальних самостійних завдань: РН 1.1-1.3, 2.1-2.4 – 60/30 балів із них 40 балів – практичні заняття, 20 балів – лекції.

- підсумкове оцінювання у формі екзамену:

Екзамен проводиться у комп'ютерному класі і оцінює РН 1.1, 2.1. Екзаменаційний білет містить 8 практичних завдань кожне з яких оцінюється у 5 балів, таким чином на екзамені студент може отримати максимально 40 балів. На виконання завдань за комп'ютером відводиться 1 година.

- умови допуску до підсумкового екзамену: набрати не менше 30 балів за семестрове оцінювання.

7.2 Організація оцінювання: (обов'язково зазначається порядок організації передбачених робочою навчальною програмою форм оцінювання із зазначенням орієнтовного графіку оцінювання).

На лекціях і практичних заняттях студенти отримують індивідуальні завдання, які вони повинні самостійно виконати у системі Maple і наступного тижня здають ці завдання. Якщо завдання не здано вчасно, то його можна здати на будь-якій наступній парі впродовж семестру.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни

Тематичний план лекцій, практичних занять та самостійних робіт

№ п/п	Номер і назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	С/Р
1	Тема 1. Вступ до системи комп'ютерної математики Maple. Короткий огляд основних можливостей. Типи даних та перетворення над ними. Складні типи виразів системи Maple.	2	2	6

2	Тема 2. Символьні алгебраїчні перетворення. Розв'язування алгебраїчних рівнянь, нерівностей та систем. Структура виразів і робота з ними. Обмеження на змінні величини у системі Maple. Команди перетворення виразів СРС 1 Написати програму для повного дослідження функції.	2	2	8
3	Тема 3. Розв'язування задач математичного аналізу за допомогою системи Maple: знаходження границь і похідних, розкладання функцій у ряд, знаходження інтегралів.	2	2	6
4	Тема 4. Графіка та анімація в Maple. СРС 2 Зобразити область інтегрування і знайти потрібний інтеграл.	2	2	8
5	Тема 5. Розв'язування (аналітичне та чисельне) звичайних диференціальних рівнянь та їх систем. СРС 3 Розв'язати диференціальне рівняння і систему диференціальних рівнянь і порівняти отриманий розв'язок із відповіддю.	2	2	8
6	Тема 6. Методи якісного аналізу систем диференціальних рівнянь першого порядку, на прикладі систем які описують еволюцію чисельності популяцій. СРС 4 Написати програму, яка знаходить стаціонарні точки нелінійної системи двох диференціальних рівнянь першого порядку, визначає їх тип, будує фазовий портрет системи і залежність $x(t)$, $y(t)$ для різних початкових умов. СРС 5 Проаналізувати всі можливі варіанти типу стаціонарної точки $(0,0)$ системи диференціальних рівнянь в залежності від параметру. Проілюструвати кожен тип стаціонарної точки фазовим портретом.	2	2	12
7	Тема 7. Візуалізація в Maple орбіталей атома гідрогену. СРС 6 Зобразити ізоповерхні (атомні орбітали) збуджених станів атому гідрогену.	2	2	8
8	Тема 8. Базисні функції гауссового типу. Енергія основного стану атома гідрогену. СРС 7 Зайти енергію збудженого стану атома водню для за формулою $\int \psi^* \hat{H} \psi d\vec{r}$,	2	2	8
9	Тема 9. Розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних. СРС 8 Розв'язати одномірне рівняння дифузії (теплопровідності) на відрізку $[0,1]$ із заданими початковою і крайовими умовами. СРС 9 Розв'язати одномірне хвильове рівняння на відрізку $[0,1]$. Початкові і крайові умови підібрати самостійно так, щоб спостерігались коливання. Для певного моменту часу записати у файл залежність $u(x)$.	2	2	12
10	Тема 10. Базові засоби програмування в системі Maple Умовні конструкції. Оператори циклу.	2	2	6
11	Тема 11. Квадратичне відображення. СРС 10 Написати програму для дослідження квадратичного відображення.	2	2	8
12	Тема 12. Теплоємність молекулярного газу.	2	2	8

	СРС 11 Порівняти залежність коливальної теплоємності молекули від температури, яка була обчислена у Gaussian, з розрахунками у Maple.			
13	Тема 13. Моделювання випадкових процесів у системі Maple. СРС 12 Обчислити площу фігури, обмеженої лініями, методом Монте-Карло.	2	2	8
14	Тема 14. Моделювання випадкових блукань. СРС 13 (додаткова) Дослідити випадкові блукання вакансії у двомірному кристалі.	2	2	8
15	Тема 15. Заключне заняття	2	2	6
	ВСЬОГО	30	30	120

Загальний обсяг 180 год⁴, в тому числі (вибрати необхідне):

Лекції – **30 год**.

Практичні заняття – **30 год**.

Самостійна робота – **120 год**.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

Основна: (Базова)

- Кузьмін А. В., Денисов С.В. Комп'ютерна алгебра : Курс лекцій та лабораторний практикум : навч. посіб / А.В. Кузьмін, С.В. Денисов. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2017. – 281 с.
- Дьяконов В. П. Maple 10/11/12/13/14 в математических расчетах. – М.: ДМК-Пресс, 2011. – 800 с.
- А. Н. Васильев Maple 8. Самоучитель. – К: Диалектика, 2003. – 352 с.
- В.П. Дьяконов. Maple 9.5/10 в математике, физике и образовании. М.: СОЛОН-Пресс, 2006. – 720 с.

Додаткова:

- А.Ф. Филиппов Сборник задач по дифференциальным уравнениям. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000. – 176 с.
- Б.П. Демидович Сборник задач и упражнений по математическому анализу – М.: "ЧеРо", 1997. – 624 с.
- В.З. Аладьев. Основы программирования в Maple. – Таллинн, 2006. – 301 с.
- О.А. Сдвижков Математика на компьютере: Maple 8. – М: СОЛОН-пресс, 2003. – 176 с.
- Цыганов. А. В. Курс лекций Квантовая механика с Maple. Санкт-Петербург, 2000.
<http://www.exponenta.ru/educat/systemat/tsiganov/00.asp>
- Егоров А.И. Обыкновенные дифференциальные уравнения и система Maple. — М.: СОЛОН-Пресс, 2016. – 392 с.
- Х. Гулд, Я. Тобочник Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. Часть 1: Пер. С англ. – М.: Мир, 1990. – 349 с.
- Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений. – М.: Издательский центр «Академия», 2008. – 384 с.

⁴ Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.