

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра квантової радіофізики

ЗАТВЕРДЖУЮ»

Проректор з науково-
педагогічної роботи

« _____ » _____ 2017 р.

Програма навчальної дисципліни

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ У КВАНТОВІЙ РАДІОФІЗИЦІ

(назва навчальної дисципліни)

спеціальність (напрямок) 105 Прикладна фізика та наноматеріали

факультет радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

2017 / 2018 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Протокол від “__” ____ 2017 року № __

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: (вказати авторів, їхні наукові ступені, вчені звання та посади)

Рибін Олег Миколайович, кандидат фізико-математичних наук, доцент

Програму схвалено на засіданні кафедри квантової радіофізики

Протокол від “__” ____ року № __

Завідувач кафедри квантової радіофізики

_____ проф. Маслов В.О.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

Протокол від “__” ____ року № __

Голова методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

_____ (проф. Черногор Л. Ф.)
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Чисельні методи у квантовій радіофізиці
складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми
підготовки

бакалавр

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

спеціальності (напрямку) 8.105 Прикладна фізика та наноматеріали

спеціалізації

квантова радіофізика та фотоніка

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є
вивчення дисципліни полягає в освоєнні студентами основних науково-практичних знань в
галузі чисельних методів

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є
знайомство студентів з чисельними методами, їх алгоритмами та застосування
чисельних методів для обчислювальних задач квантової радіофізики.

1.3. Кількість кредитів – 5

1.4. Загальна кількість годин – 150

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	
Рік підготовки	
3-й	
Семестр	
6-й	
Лекції	
48 год.	
Практичні, семінарські заняття	
32 год.	
Лабораторні заняття	
Самостійна робота	
70 год.	
Індивідуальні завдання	

1.6. Заплановані результати навчання
знати: основи чисельних методів та їх алгоритми

вміти: вибрати, застосувати та програмувати чисельні методи для обчислювальних задач квантової радіофізики.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Моделювання фізичних явищ, похибки обчислення, рішення алгебраїчних рівнянь, лінійні алгебраїчні рівняння

Тема 1. Моделювання, програмування, похибка обчислення.

Математичне моделювання и рішення наукових проблем за допомогою ПК, Програмування у середовищі R, Апроксимація и похибки обчислення.

Тема 2. Алгебраїчні рівняння та знаходження коренів.

Алгоритм пошуку шляхом бісекції, метод Ньютона, метод січної, метод простих ітерацій, приклади застосування алгебраїчних рівнянь та моделей на їх базі до рішення фізичних задач.

Тема 3. Лінійні алгебраїчні рівняння.

Метод Гауса, LU декомпозиція та інвертування матриць, спеціальні матриці и алгоритм Гауса, приклади застосування систем алгебраїчних рівнянь та моделей на їх базі до рішення фізичних задач.

Розділ 2. Оптимізація, інтерполяція та екстраполяція, метод найменших квадратів, численне диференціювання та інтегрування

Тема 1. Оптимізація.

Одновимірна безумовна оптимізація, багатовимірна безумовна оптимізація, оптимізація з обмеженнями, приклади застосування методу оптимізації для моделювання фізичних систем

Тема 2. Інтерполяція та екстраполяція.

Інтерполяція. Многочлен Лагранжа. Многочлен Ньютона. Многочлен Чебишева. Метод найменших квадратів. Многочлени Ерміта. Сплайни.

Тема 3 Численне диференціювання та інтегрування.

Формула Ньютона-Коші для обчислення інтегралів, інтегрування рівнянь, численні методи диференціювання, приклади використання алгоритмів в моделювання фізичних явищ.

Розділ 3. Рішення диференційних рівнянь, рішення рівнянь математичної фізики

Тема 1. Диференційні рівняння.

Метод Рунге-Кута, детерміністичні і багатоступінчасті методи, рішення задачі Коші, приклади використання алгоритмів в моделювання фізичних явищ.

Тема 2. Диференційні рівняння у частинних похідних.

Рішення еліптичних рівнянь, рішення параболічних рівнянь за допомогою метода кінцевих різниць і методі кінцевих елементів, приклади використання алгоритмів в моделювання фізичних явищ.

Тема 3. Підсумки курсу.

Методологія алгоритмічного підходу до модулювання складних квантово-механічних систем.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин					
	денна форма					
	усього	у тому числі				
л		п	лаб.	інд.	с. р.	
1	2	3	4	5	6	7
Розділ 1. . Моделювання фізичних явищ, похибки обчислення, рішення алгебраїчних рівнянь, лінійні алгебраїчні рівняння.						
Тема 1. Моделювання, програмування, похибка обчислення	16	4	3			9
Тема 2. Алгебраїчні рівняння та знаходження коренів	20	6	4			10
Тема 3. Лінійні алгебраїчні рівняння.	18	5	4			9
Разом за розділом 1	54	15	11			28
Розділ 2 Оптимізація, інтерполяція та екстраполяція, метод найменших квадратів, численне диференціювання та інтегрування.						
Тема 1. Оптимізація.	45	6	3			9
Тема 2. Інтерполяція та екстраполяція.	19	6	4			9
Тема 3. Численне диференціювання та інтегрування	19	6	4			9
Разом за розділом 2	56	18	11			27
Розділ 3 Рішення диференційних рівнянь, рішення рівнянь математичної фізики.						
Тема 1. Диференційні рівняння.	16	5	4			7
Тема 2. Диференційні рівняння у частих похідних.	17	5	4			8
Тема 3. Підсумки курсу	7	5	2			
Разом за розділом 3	40	15	10			15
Усього годин	150	48	32			70

4. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Похибки обчислень. Визначення похибки вимірювання перетворювача із дискретними елементами.	3
2	Числове інтегрування. Визначення фактора ефективності тиску світла на заломлюючому циліндрі.	5
3	Чисельне рішення рівнянь. Визначення коефіцієнту поглинання ліній обертового спектру молекул.	4
4	Системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Обчислення частот рідбергівського спектру атомів лужних металів.	5
5	Теорія наближення. Метод найменших квадратів. Пряма та зворотна задача молекулярної спектроскопії.	4
6	Теорія наближення. Відбудова розподілу поля в лазерному пучку методом чотирьох проєкцій.	5
7	Диференційні рівняння. Рівняння теплопровідності. Калориметричний метод вимірювання потужності, різниці температур та енергій.	6
	Разом	32

5. Завдання для самостійної роботи

1	Програмування у середовищі R. Дані. Вираження. Оператори. Функції й підпрограми.	11
2	Похибки обчислень. Визначення розподілу поля при розповсюдженні пучка випромінювання в хвилеводі типу “канал в діелектрику”.	10
3	Числове інтегрування. Дослідження типів коливань хвильоводних субміліметрових лазерів з оптичним накачуванням.	12
4	Чисельне рішення рівнянь. Обчислення частот тонкої структури рідбергівського спектру атомів лужних металів.	9
5	Системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Дослідження Фур’є - моди конфокального резонатора з рівномірним розділом амплітуди на одному із джерел.	10
6	Теорія наближення. Визначення квантового дефекту рідбергівського спектру атомів лужних металів. Зворотна задача атомної спектроскопії.	9
7	Звичайні диференційні рівняння. Визначення характеристик дифракційного відгалужувача.	9
Усього годин		70

6. Індивідуальні завдання

Індивідуальні завдання складаються з навчально-методичних проєктів, які містять задачі для глибшого засвоєння лекційного матеріалу.

7. Методи контролю

Засвоєння матеріалу по дисципліні забезпечується циклом лекцій, розв'язанням задач на практичних заняттях, а також самостійною роботою.

8. Схема нарахування балів

Поточне тестування та самостійна робота											Підсумковий модуль	сума	
Розділ 1				Розділ 2				Розділ 3				40	100
T1	T2	T3	KP	T1	T2	T3	KP	T1	T2	T3	KP		
4	4	4	8	4	4	4	8	4	4	4	8		

9. Рекомендована література

Основна література

1. Самарский А.А. Введение в численные методы. М., 1983, 271 с.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы. М., 1976, 512 с.
3. Боглаев Ф.П. Вычислительная математика и программирование. М., Высшая школа, 1990 г., 544 с.
4. Мак-Кракен Д., Дорн У. Численные методы и программирование на ФОРТРАНЕ. М., Мир, 1977, 584 с.

Допоміжна література

1. Форсайт Д., Мальккольн М., Маулера К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
2. Щуп Т.Е. Прикладные численные методы в физике и технике. М., Высшая школа, 1990, 251с.
3. Смит К., Томсон Р. Численное моделирование газовых лазеров, М., Мир, 1981, 516.
4. Болосин Ю.А., Крылов К.И., Шарлай С.Ф. Применение ЭВМ при разработке лазеров. Л., Машиностроение, 1989, 236 с.
5. Бартенев О.В. Современный фортран. М.: Диалог-МИФИ, 2000, 433 с.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

- 1,Edx.org
- 2,Courser.org