

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.ліфшиця



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан факультету (директор  
навчально-наукового інституту)  
фізичний факультет

(вказати назву структурного підрозділу)

ВОВК Руслан Володимирович

(вказати П.І.Б керівника)

“ 30 ” 08 2023р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Чисельні методи теоретичної фізики

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти бакалавр

галузь знань 10 Природничі науки  
(шифр і назва)

спеціальність 104 – Фізика та астрономія  
(шифр і назва)

освітня програма “Фізика”  
(шифр і назва)

спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)

вид дисципліни за вибором  
(обов'язкова / за вибором)

факультет фізичний

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

“ 30 ” 08 2023 року, протокол № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

**Славін Віктор Валерійович, доктор фіз-мат. наук, с.н.с.**

Програму схвалено на засіданні кафедри

теоретичної фізики імені академіка. М. Ліфшиця

Програму схвалено на засіданні кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця

Протокол від “ 28 ” 08 2023 року № 9

Завідувач кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця

(підпис)

Рашба Г.І.  
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньої програми

фізика (спеціальність 104 – фізика та астрономія)

назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми  
(керівник проектної групи) Лазоренко О.В.

(підпис)

Лазоренко О.В.  
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією

фізичного факультету

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “ 29 ” 08 2023 року № 7

Голова методичної комісії фізичного факультету

(підпис)

Макаровський М.О.  
(прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “**Чисельні методи теоретичної фізики**” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки першого рівню вищої освіти – бакалавр, спеціальності (напрямку) 104 – фізика та астрономія спеціалізації

### 1. Опис навчальної дисципліни

#### 1.1. Мета та завдання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «**Чисельні методи теоретичної фізики**» є формування уявлень студентів про сучасні методи чисельного моделювання фізичних процесів у фізиці конденсованого стану.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни «**Чисельні методи теоретичної фізики**» є навчити студентів

- основам чисельних методів,
- основним математичним та теор. фізичним підходам, що лежать у основі чисельних методів,
- користуванню стандартними чисельними методами при дослідженні кінетичних, динамічних та термодинамічних властивостей твердих тіл.
- Вмінню роботи з науковою та довідковою літературою, вмінню обирати адекватні чисельні методи розв’язку задач теоретичної фізики конденсованого стану.

*Компетентності, що забезпечуються дисципліною:*

- Здатність розв’язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується складністю та невизначеністю умов (ІК).

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК-2).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-3).
- Здатність бути критичним і самокритичним (ЗК-4).
- Здатність приймати обґрунтовані рішення (ЗК-5).
- Навички міжособистісної взаємодії (ЗК-6).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК-8).
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов’язків (ЗК-9).
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК-12).
- Здатність спілкуватися іноземною мовою (ЗК-13).
- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії (ФК-1).

- Здатність працювати із науковим обладнанням та вимірювальними приладами, обробляти та аналізувати результати досліджень (ФК-4).

- Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв’язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем (ФК-5).

- Здатність моделювати фізичні системи та астрономічні явища і процеси (ФК-6).

- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об’єктів, законів існування та еволюції Всесвіту (ФК-7).

- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації (ФК-9).

- Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей (ФК-10).
- Усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних та астрономічних досліджень (ФК-12).
- Орієнтація на найвищі наукові стандарти - обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук. (ФК-13).
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК-14).

1.3. Кількість кредитів 3.

1.4. Загальна кількість годин 90.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни
За вибором
Денна форма навчання
Рік підготовки
3-й
Семестр
5-й
Лекції
22
Практичні, семінарські заняття
Не передбачені навчальним планом
Лабораторні заняття
Не передбачені навчальним планом
Самостійна робота
68 год. (в тому числі 20 год. на курсову роботу)
Індивідуальні завдання
Курсова робота
Під час самостійної роботи 20 год. (з 68 год.)
<b>Залік</b>

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

Набути базові уявлення про дослідження і основні прийоми якісного та кількісного аналізу моделей теоретичної фізики різними чисельними методами.

*Програмні результати навчання, що забезпечуються дисципліною:*

- Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії (ПРН-1).

- Знати і розуміти фізичні основи астрономічних явищ: аналізувати, тлумачити, пояснювати і класифікувати будову та еволюцію астрономічних об'єктів Всесвіту (планет, зір, планетних систем, галактик тощо), а також основні фізичні процеси, які відбуваються в них (ПРН-2).

- Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій (ПРН-3).
- Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії (ПРН-5).
- Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії (ПРН-6).
- Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації (ПРН-7).
- Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань (ПРН-8).
- Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки (ПРН-11).
- Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень (ПРН-13).
- Знати і розуміти роль і місце фізики, астрономії та інших природничих наук у загальній системі знань про природу та суспільство, у розвитку техніки й технологій та у формуванні сучасного наукового світогляду (ПРН-17).
- Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства (ПРН- 22).
- Розуміти історію та закономірності розвитку фізики та астрономії (ПРН-23).
- Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій (ПРН-24).
- Мати навички самостійного прийняття рішень стосовно своїх освітньої траєкторії та професійного розвитку (ПРН-25).

## **2. тематичний план навчальної дисципліни**

### **Розділ 1. Математичні основи чисельних методів теоретичної фізики**

- Тема 1. Метод найменших квадратів, поліноміальне наближення.
- Тема 2. Чисельне інтегрування та диференціювання.
- Тема 3. Дискретне Фур'є перетворення та фільтрація частотних сигналів.
- Тема 4. Аналого-цифрові та цифро-аналогові перетворення.
- Тема 5. Чисельне розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь.
- Тема 6. Метод бісекції.
- Тема 7. Метод хорд.
- Тема 8. Метод Ньютона.
- Тема 9. Метод оберненої матриці.
- Тема 10. Метод Крамера.
- Тема 11. Метод Гауса.
- Тема 12. Чисельне розв'язування нелінійних рівнянь та систем нелінійних рівнянь методом Ньютона.
- Тема 13. Чисельне розв'язування нелінійних диференціальних рівнянь та систем нелінійних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутти.

## Розділ 2. Чисельне моделювання у теоретичній фізиці конденсованого стану

Тема 14. Класичні методи Монте-Карло.

Тема 15. Метод молекулярної динаміки.

Тема 16. Метод точної діагоналізації.

Тема 17. Квантові методи Монте -Карло (Quantum Monte Carlo).

Тема 18. Теорія функцій щільності (DFT).

Тема 19. Метод ренормгрупи матриці густини (DMRG).

### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	інд	с.р	
1	2	3	4	5	6	7
<b>7 семестр</b>						
<b>Розділ 1. Математичні основи чисельних методів теоретичної фізики</b>						
Тема 1	4	0.5				3.5
Тема 2	4	0.5				3.5
Тема 3	5.5	2				3.5
Тема 4	5.5	2				3.5
Тема 5	5.5	2				3.5
Тема 6	4.5	1				3.5
Тема 7	4.5	1				3.5
Тема 8	4.5	1				3.5
Тема 9	4.5	1				3.5
Тема 10	4.5	1				3.5
Тема 11	4.5	1.5				3
Тема 12	4.5	1.5				3
Тема 13	5	2				3
Разом за розділом 1	61	17				44
<b>Розділ 2. Чисельне моделювання у теоретичній фізиці конденсованого стану</b>						
Тема 14	4.5	0.5				4
Тема 15	5	1				4
Тема 16	5	1				4
Тема 17	5	1				4
Тема 18	5	1				4
Тема 19	4.5	0.5				4
Разом за розділом 2	29	5				24
<b>Усього годин</b>	<b>90</b>	<b>22</b>				<b>68</b>
<b>Залік</b>						

#### 4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

Практичні заняття учбовим планом не передбачені.

#### 5. Завдання для самостійної роботи

Пояснення щодо того, що повинен зробити студент під час самостійної роботи.

По всім нижче вказаним темам опрацювати конспекти лекцій, прочитати відповідні параграфи в підручниках та монографіях. Самостійно підготуватися до контрольної роботи.

Назва теми	Кількість годин
1	2
Тема 1. Метод найменших квадратів, поліноміальне наближення.	3
Тема 2. Чисельне інтегрування та диференціювання.	3
Тема 3. Дискретне Фур'є перетворення та фільтрація частотних сигналів.	3
Тема 4. Аналого-цифрові та цифро-аналогові перетворення.	3
Тема 5. Чисельне розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь.	3
Тема 6. Метод бісекції.	3.5
Тема 7. Метод хорд.	3.5
Тема 8. Метод Ньютона.	3.5
Тема 9. Метод оберненої матриці.	3.5
Тема 10. Метод Крамера.	3.5
Тема 11. Метод Гауса.	3.5
Тема 12. Чисельне розв'язування нелінійних рівнянь та систем нелінійних рівнянь методом Ньютона.	3.5
Тема 13. Чисельне розв'язування нелінійних диференціальних рівнянь та систем нелінійних диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутти.	3.5
Тема 14. Класичні методи Монте-Карло.	3.5
Тема 15. Метод молекулярної динаміки.	3.5
Тема 16. Метод точної діагоналізації.	3.5
Тема 17. Квантові методи Монте -Карло (Quantum Monte Carlo).	3.5
Тема 18. Теорія функцій щільності (DFT).	4.5
Тема 19. Метод ренормгрупи матриці густини (DMRG).	2
<b>Усього</b>	<b>63.5</b>

## 6. Індивідуальні завдання

Курсова робота

## 7. Методи контролю

Поточне опитування, участь у семінарських заняттях, контрольна робота, залік.

## 8. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання				Залік	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Курсова робота	Разом		
T1-T25	T26-T36				
10	10	20	40	60	100

Для зарахування розділу 1 та розділу 2 треба набрати у підсумку не менше 5 балів за результатами поточного опитування. Для зарахування курсової роботи за матеріалами розділів 1 та 2 треба набрати у підсумку не менше 10 балів. Для допуску до письмового заліку треба набрати у підсумку не менше 20 балів.

Примітка.

1. Оцінка, яку отримує студент за кожну тему відповідає відсоткові правильного виконання поставленого завдання. Завдання вважається виконаним правильно, коли студент самостійно дав повну, вірну та вичерпну відповідь, не користуючись жодними зовнішніми джерелами інформації або підказками інших осіб, а також може (в разі необхідності) дати *прилюдне вірне, повне та вичерпне пояснення* щодо змісту цієї відповіді

2. У разі виявлення факту **академічної недоброчесності** із боку студента підчас перевірки курсової роботи оцінка за неї **повинна бути зменшена до 0** (пункт 7.12.5 «Положення про організацію освітнього процесу в ХНУ імені В. Н. Каразіна», наказ ректора № 0202-1/155 від 21.04.2017 р.).

3. До підсумкового семестрового контролю (заліку) допускається студент денної форми навчання, який створив повний **рукописний** конспект лекцій, пройшов поточне опитування й написав контрольну роботу та набрав не менш, ніж **20 балів**.

4. У разі виявлення факту **академічної недоброчесності** із боку студента підчас іспиту його екзаменаційна оцінка **повинна бути зменшена до 0**, а сам студент **має бути видалений з аудиторії**, до проводиться іспит (пункт 7.12.5 «Положення про організацію освітнього процесу в ХНУ імені В. Н. Каразіна», наказ ректора № 0202-1/155 від 21.04.2017 р.).

Білет письмового заліку складається з двох теоретичних питань. Максимальна оцінка за кожне з питань 30 балів. Максимальна оцінка за залік – 60 балів.

### **Критерії оцінювання письмової залікової роботи**

Білет складається з двох теоретичних питань. Кожне питання оцінюється в 30 балів. У відповіді на теоретичні питання студент повинен продемонструвати знання теорії навчальної дисципліни «Теорія кристалічної решітки» та її понятійно-категоріального апарату, термінології, понять і принципів предметної області дисципліни.

Максимальні бали виставляються в разі чіткої, логічної, послідовної письмової відповіді на поставлене питання, з висновками основних формул, формулюванням фізичних законів

У процесі оцінювання теоретичних завдань залікового білету враховуються:

- повнота розкриття питання (6 бали);
- уміння чітко формулювати визначення фізичних понять, термінів та пояснювати їх (6 бали);
- здатність аргументувати отриману відповідь (6 бали);
- здатність робити аналітичні міркування, порівняння, формулювання висновків (6 бали);
- логічна послідовність викладення матеріалу у відповіді на завдання (6 бали).

Відповідь має бути обґрунтованою, з посиланням на відповідні фізичні закони та рівняння, з послідовними розрахунками всіх основних формул, доведеними до кінцевого результату з чіткою відповіддю на поставлене питання. За рішення задачі (практичного завдання) нараховуються такі бали:

1. Повна та послідовно обґрунтована відповідь отримує оцінку 30 балів у випадку, коли студент отримав правильну відповідь і продемонстрував метод і спосіб її отримання.
2. Оцінка 20-29 балів виставляється за відповідь, в якій є несуттєві похибки в логіці викладу.
3. Відповідь на питання отримує оцінку 16-19 балів, коли студент не отримав правильну відповідь або написав тільки кінцеву формулу без пояснень та виводу.



4. Відповідь на питання отримує оцінку 0-15 балів, коли студент не отримав правильну відповідь, причому метод і спосіб розв'язання завдання були не вірними. **Залік зданий, якщо сумарна оцінка за письмову залікову роботу не менше 30 балів, а сумарний підсумковий бал не менше 50 балів.**

#### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

### 9. Рекомендована література

#### Основна література

1. Heermann Dieter W. Computer Simulation Methods in Theoretical Physics. Springer, 1990. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-75448-7>
2. Chen Ke, Schönlieb Carola-Bibiane. Handbook of Mathematical Models and Algorithms in Computer Vision and Imaging. Springer, 2023.
3. Nemoshalenko V.V., Antonov N.V. Computational Methods in Solid State Physics. CRC Press, 2000.
4. Pang Tao, Gould Harvey, Tobochnik Jan. An Introduction to Computational Physics. American Journal of Physics, **67**, 94–95 (1999) DOI: <https://doi.org/10.1119/1.19198>
5. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, Inc, 2004
6. Kittel C. Quantum theory of solids. New York-London: John Wiley & Sons, Inc., 1991

#### Допоміжна література

1. Sandvik Anders W. Computational Studies of Quantum Spin Systems. Cond-mat arXiv (<https://arxiv.org/abs/1101.3281>)
2. Sirca Simon, Horvat Martin. Computational Methods for Physicists. Springer, 2012.
3. Degond Pierre, Pareschi Lorenzo, Russo Giovanni. Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations. Birkhäuser, 2003.

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

#### Сайт кафедри теоретичної фізики:

[http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students\\_study\\_ukr.html](http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students_study_ukr.html)  
[http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students\\_ref\\_ukr.html](http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students_ref_ukr.html)