

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця

“ЗАТВЕРДЖУЮ”



Проректор
з науково-педагогічної роботи

Пантелеймонов А. В.

Азаренков М.

серпень 2018 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Використання ПК у наукових дослідженнях

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____ бакалавр _____

галузь знань _____

(шифр і назва)

Спеціальність/напрямок підготовки _____ 6.040203 – фізика _____

(шифр і назва)

освітня програма _____

(шифр і назва)

спеціалізація _____

(шифр і назва)

вид дисципліни _____ обов'язкова _____

(обов'язкова / за вибором)

факультет _____ фізичний _____

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

“ 21 ” 06 2018 року, протокол № 7


РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Апостолов Станіслав Сергійович, канд. фіз.-мат. наук, доц., Єзерська Олена Володимирівна, канд. фіз.-мат. наук, доц.

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

Протокол від “ 15 ” 06 2018 року № 7

Завідувач кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця


(підпис)

Рашба Г.І.
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
фізичного факультету
назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “ 19 ” 06 2018 року № 6

Голова методичної комісії фізичного факультету


(підпис)

Макаровський М.О.
(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «**Використання ПК у наукових дослідженнях**» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки першого рівню вищої освіти – бакалавр, спеціальності (напрямку) 6.040203 - фізика спеціалізації

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета та завдання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «Використання ПК у наукових дослідженнях» є формування уявлень студентів про сучасні комп'ютерні технології та методи комп'ютерного моделювання в фізиці.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни «Використання ПК у наукових дослідженнях»

навчити студентів

- проводити науковий пошук за допомогою Internet ресурсів,
- розробляти презентації лекцій та наукових доповідей за допомогою PowerPoint,
- основам програмування за допомогою символьного пакету Mathematica,
- основам роботи із графічним редактором Origin,
- вибирати адекватні підходи для вирішення фізичних задач точними та наближеними методами за допомогою навчальної та довідкової літератури із використанням можливостей ПК.

1.3. Кількість кредитів 4.

1.4. Загальна кількість годин 120.

| |
|--|
| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни |
| Обов'язкова |
| Денна форма навчання |
| Рік підготовки |
| 4-й |
| Семестр |
| 7-й |
| Лекції |
| Не передбачені навчальним планом |
| Практичні, семінарські заняття |
| 48 год. |
| Лабораторні заняття |
| Не передбачені навчальним планом |
| Самостійна робота |
| 72 год. (в тому числі 20 год. на курсову роботу) |
| Індивідуальні завдання |
| Курсова робота |
| Під час самостійної роботи 20 год. (з 72 год.) |
| Залік |

1.6. Заплановані результати навчання

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

Набути базові уявлення про можливості використання сучасних інформаційних технологій для проведення наукових досліджень і опрацювання їх результатів, принципи і методи використання ПК у наукових дослідженнях

Бути здатними застосовувати відповідні графічні редактори та символні пакети математичних обчислень для точного та наближеного розв'язку фізичних задач.

2. тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. СУЧАСНІ КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Тема 1. Операційна система Windows та офісний пакет Microsoft Office: робота з текстами, електронними таблицями, презентаціями, базами даних. Редактор формул MathType.

Тема 2. Відкритий офісний пакет Open Office як альтернатива Microsoft Office.

Тема 3. Видавнича система для наукових публікацій LaTeX.

Тема 4. Науковий пошук в Internet. Бібліографічні та реферативні бази даних: платні – Web of Science, Scopus та безкоштовні – Research Gate, Scholar Google, ORCID. Безкоштовна база наукових публікацій xxx.lanl.gov.

Тема 5. Підготовка презентацій та демонстрацій за допомогою PowerPoint.

Розділ 2. КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Тема 6. Вільна система комп'ютерної алгебри Maxima.

Тема 7. Система комп'ютерних обчислень Mathematica.

Тема 8. Графічні можливості Mathematica.

Тема 9. Робота із масивами в Mathematica.

Тема 10. Диференціювання та інтегрування в системі Mathematica.

Тема 11. Символьне та чисельне вирішення алгебраїчних та трансцендентних рівнянь.

Тема 12. Вирішення диференціальних рівнянь в системі Mathematica. Нове в останніх версіях Mathematica: пошук власних значень та власних функцій за допомогою команди DEigenSystem.

Тема 13. Фур'є-аналіз в Mathematica.

Тема 14. Методи комп'ютерної анімації в Mathematica.

Тема 15. Експорт та імпорт даних в Mathematica.

Тема 16. Моделювання нелінійних коливань в класичній механіці: фазові портрети, точки біфуркації.

Тема 17. Моделювання в квантовій механіці: тунельний ефект, періодичні потенціали.

Тема 18. **Origin** – пакет програм для чисельного аналізу даних та наукової графіки. Перше знайомство з пакетом Comsol-Multiphysics

3. 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 |
| Розділ 1. СУЧАСНІ КОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ | | | | | | |

| | | | | | | |
|---|------------|--|-----------|--|-----------|-----------|
| Тема 1 | 6 | | 3 | | | 3 |
| Тема 2 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Тема 3 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Тема 4 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Тема 5 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Разом за розділом 1 | 34 | | 15 | | | 19 |
| Розділ 2. КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ | | | | | | |
| Тема 6 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Тема 7 | 7 | | 3 | | | 4 |
| Тема 8 | 7 | | 3 | | 2 | 2 |
| Тема 9 | 7 | | 3 | | 2 | 2 |
| Тема 10 | 7 | | 3 | | 2 | 2 |
| Тема 11 | 7 | | 3 | | 2 | 2 |
| Тема 12 | 6 | | 3 | | 2 | 2 |
| Тема 13 | 6 | | 2 | | 2 | 2 |
| Тема 14 | 6 | | 2 | | 2 | 2 |
| Тема 15 | 6 | | 2 | | 2 | 2 |
| Тема 16 | 6 | | 2 | | 2 | 2 |
| Тема 17 | 7 | | 2 | | 2 | 3 |
| Тема 18 | 7 | | 2 | | | 4 |
| Разом за розділом 2 | 86 | | 33 | | 20 | 33 |
| Усього годин | 120 | | 48 | | 20 | 52 |

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

Теми практичних занять визначаються відповідними темами курсу.

5. Завдання для самостійної роботи

| № з/п | Види, зміст самостійної роботи | Кількість годин |
|---------|---|-----------------|
| 1 | 2 | 2 |
| Тема 1. | Розглянути можливості редактору формул Mathtype та вбудованого редактору формул пакету Microsoft Word. Підготувати електронну версію однієї з лекцій (за вибором студента) | 3 |
| Тема 2. | Розглянути можливості відкритого пакету Open Office. Підготувати електронну версію однієї з лекцій (за вибором студента) | 4 |
| Тема 3. | Ознайомитися зі структурою документів LaTeX та можливостями оформлення математичних формул. | 4 |
| Тема 4. | Провести самостійно пошук електронних ресурсів та посилань за темою своєї випускної роботи бакалавра. | 4 |
| Тема 5. | Зробити презентацію лекції по спецкурсу (за вибором студента) | 4 |
| Тема 6. | Робота онлайн з символьним пакетом «Mathima» – обчислення інтегралів, побудова графіків | 4 |
| Тема 7. | Самостійно за допомогою команди “HELP – F1” навчитися знаходити основні команди Mathematica (Plot, Integrate, Solve, DSolve та ін.), їх опис, приклади застосування. | 4 |
| Тема 8. | Побудова графіків елементарних та спеціальних функцій в Mathematica: двовимірні, тривимірні, контурні, векторні, параметричні графіки. Команди Graphics, Graphics3D, ArrowPlot, | 4 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| | DensityPlot, DensityPlot3D. В тому числі виконання курсової роботи – <u>1 год.</u> | |
| Тема 9. | Обробка масивів даних. Команди List, Table, Select, Join, Union. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 10. | Символьне та чисельне диференціювання та інтегрування в системі Mathematica. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 11. | Символьне та чисельне вирішення алгебраїчних та трансцендентних рівнянь за допомогою команд Solve, Roots, NSolve, FindRoot. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 12. | Символьне та чисельне вирішення диференціальних рівнянь. Застосування для стаціонарного рівняння Шредінгера за допомогою команд DSolve, NDSolve, DEigensystem. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 13. | Знаходження коефіцієнтів ряду Фур'є, Фур'є перетворення, дискретне Фур'є перетворення. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 14. | Самостійно придумати та реалізувати приклади використання команд Animate, Manipulate. Створення gif-файлів, .avi та .swf для анімацій. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 15. | Самостійно провести експорт та імпорт даних в різних форматах, користуючись командою Table для створення таблиць з графічних файлів. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 16. | Провести вивчення нелінійного маятника Дюфінга та двох слабо пов'язаних маятників. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 4 |
| Тема 17. | Змодельовати коефіцієнти проходження та відбиття в одномірних квантових потенціалах із сингулярностями за допомогою методу трансфер-матриці. В тому числі виконання курсової роботи – <u>2 год.</u> | 5 |
| Тема 18. | Провести графічну обробку експериментальних даних в Origin, користуючись різними засобами згладжування даних (лінійне наближення, наближення поліномами, наближення B-сплайнами). | 4 |
| | Разом | 72 |

6. Індивідуальні завдання

Курсова робота, яка виконується під час самостійної роботи.

Запропоновані теми курсових робіт

1. Моделювання «фазових портретів» одновимірних механічних систем.
2. Моделювання слабо нелінійних двовимірних коливань.
3. Порівняне моделювання руху нерелятивістської та релятивістської частинки у кулоновому полі.
4. Моделювання руху математичного маятника для різних енергій.
5. Фур'є-аналіз складних коливань.
6. Моделювання поширення електромагнітних хвиль у системах з включенням плоского зразка з анізотропною електрополяризацією за допомогою пакету Comsol-Multiphysics.
7. Моделювання хвильових пакетів.
8. Порівняне моделювання та розрахунки одновимірного руху класичної та квантової частинки в полі потенціалу Морзе
9. Порівняне моделювання та розрахунки одновимірного руху квантової частинки в полі потенціалу Морзе в квазікласичному наближенні та точно.

10. Порівняне моделювання та розрахунки одновимірного руху класичної та квантової частинки в полі потенціалу $U = -U_0 \operatorname{ch}^2(x/a)$.
11. Порівняне моделювання та розрахунки одновимірного руху квантової частинки в полі потенціалу Морзе в квазікласичному наближенні та точно $U = -U_0 \operatorname{ch}^2(x/a)$.
12. Комп'ютерне вирішення задачі про локальні рівні (дискретний спектр) потенціалів із сингулярностями за допомогою методу трансфер-матриці.
13. Моделювання поведінки феромагнітної рідини.
14. Чисельне моделювання двукомпонентної графітаційної лінзи за допомогою «рейтрейсинга»

Примітка. Студенти за згодою з викладачем можуть самі пропонувати теми курсових робіт, які пов'язані з їх науковою роботою.

7. Методи контролю

Поточне опитування, курсова робота, перевірка домашніх завдань, залік.

8. Схема нарахування балів

| | | | |
|---|----------|----------------|------|
| Поточний контроль, опитування, перевірка домашніх завдань самостійна робота, курсова робота | | | Сума |
| Розділ 1 | Розділ 2 | Курсова робота | |
| T1-T5 | T6-T18 | T8-T17 | |
| 30 | 30 | 40 | 100 |

Для зарахування розділу 1 та розділу 2 треба пройти опитування, виконати домашні завдання та отримати не менше 15 балів у підсумку за кожен з розділів. Студент повинен написати курсову роботу, подати її в електронному вигляді, представити презентацію, усно захистити її й отримати не менше 20 балів. В курсовій роботі треба представити 2-3 оригінальні програми, написані в Mathematica 13, протоколи їх роботи та комп'ютерні анімації. Залік виставляється за підсумками поточного контролю та за результатом захисту курсової роботи. **Для отримання заліку треба набрати у підсумку 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. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. – М: Мир, 1990.- Ч. 1.- 349 с.; Ч. 2.- 400 с.
2. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики . – Х.: Вища школа, 1987. - 144 с.

3. Тельников К.О., Чеботаев П.З. LATEX. Издательская система для всех. – Новосибирск: Сибирский хронограф, 1994.- 294 с.
4. Львовский С.М. Набор и верстка в пакете LATEX.- М.: Космосинформ, 1994.- 32 8 с.
5. Спивак М. Восхитительный TEX: Руководство по комфортному изготовлению научных публикаций в пакете AMS-TEX.- М.: Мир,1993. – 285 с.
6. Беляков Н.С., Палош В.Е., Садовский П.А. TeX для всех: Оформление учебных и научных работ в системе LaTeX PDF
М.: Книжный дом "Либроком", 2009. – 208 с.
7. Капустина Т.В. Компьютерная система Mathematica 3.0 для пользователей. – М. : СОЛОН-Р, 1999. - 240 с.
8. Дьяконов В.П. Системы символьной математики Mathematica 2 и Mathematica 3. - М.: СК Пресс, 1998. - 328 с.
9. Дьяконов В.П. Mathematica 4: учебный курс. - СПб: Питер, 2001. – 656 с.
10. Дьяконов В.П. Mathematica 5.1/5.2/6. Программирование и математические вычисления. – М. : ДМК-Пресс, 2008. - 576 с.
11. Половко А.М. Математика для студента. – Спб. : БХВ-Петербург, 2007. – 368 с.

Допоміжна література

1. Ульянов В.В. Компьютерные исследования квантовых явлений. Ч. 1 / В.В. Ульянов, Н.В. Ульянов. Монография. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2012. –208 с. (<http://dspace.univer.kharkov.ua/handle/123456789/8612>)
2. Ульянов В.В. Компьютерные исследования квантовых явлений. Ч. 2 / В.В. Ульянов, Н.В. Ульянов. Монография. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2013. –272 с. (http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/Robochi%20programy/comp_metody_issl_part_2.pdf)

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

1. Віртуальний підручник Wolfram Mathematica на українській та російській мові.
<http://infrastructure.kiev.ua/news/129/>
та на англійській мові
<http://reference.wolfram.com/language/tutorial/VirtualBookOverview.html>