

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра загальної фізики

Затверджено

На засіданні кафедри загальної фізики
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 1 від 30.08.2022 р.)

Завідувач кафедри



проф. Стадник В.Й.

Силабус
з навчальної дисципліни «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»,
що викладається в межах
ОПП «Комп'ютерна фізика»
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності 104 Фізика та астрономія

Львів 2022

Назва дисципліни	Комп'ютерне моделювання фізичних процесів
Адреса викладання дисципліни	вул. Драгоманова, 19, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	фізичний факультет, кафедра загальної фізики
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 104 Фізика та астрономія
Викладачі дисципліни	професор кафедри загальної фізики, д.ф.-м.н. Демків Тарас Михайлович доцент кафедри загальної фізики, к.ф.-м.н. Щепанський Павло Андрійович
Контактна інформація викладачів	taras.demkiv@lnu.edu.ua , tmdemkiv@gmail.com , pavlo.shchepanskyi@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/schepanskyj-p-a
Консультації з курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Можливі також он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/kompyuterne-modelyuvannya-fizychnyh-protsesiv
Інформація про дисципліну	Дисципліна пов'язує аналіз фізичних процесів з інструментарієм сучасних інформаційних технологій і відіграє інтегруючу роль, сприяючи розвитку навичок використання обчислювальних систем для вирішення професійних завдань. Курс комп'ютерного моделювання фізичних процесів розширює знання майбутніх бакалаврів в області дискретної математики, дає навички опису складних фізичних процесів за допомогою математичного апарату, складання алгоритму вирішення завдання, переклад алгоритму на мову програмування Python, отримання результатів за допомогою комп'ютера та проведення їх аналізу.
Коротка анотація дисципліни	Програма вивчення навчальної дисципліни “Комп'ютерне моделювання фізичних процесів” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки бакалаврів спеціальності 104 – Фізика та астрономія. Її викладають у 7 та 8 семестрах в обсязі 7 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Програма навчальної дисципліни складається з чотирьох змістових модулів: 1. Комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки. 2. Комп'ютерне моделювання методами <i>ab initio</i> . 3. Математичне моделювання за допомогою ООП Python. 4. Математичне моделювання за допомогою математичного середовища SAGE.
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни “Комп'ютерне моделювання фізичних процесів” є формування необхідних теоретичних знань і практичних навичок, пов'язаних із застосуванням методів комп'ютерного моделювання фізичних процесів з використанням бібліотек мови програмування Python та програм на базі квантово-хімічних розрахунків.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Barry P. Head First Python (2nd Edition). – All IT books. – 2016. – 624 p. 2. Lutz M. Learning Python – Published by O'Reilly Media, Inc., 2013. 3. https://uk.wikibooks.org/wiki/Підручник_мови_Python/Неформальний_вступ_до_мови_Python . 4. Васильєв А. Програмування мовою Python. – Навчальна книга – Богдан. – 2018. – 504 с.

	<p>5. С.В.Шокалюк. Основи роботи в .SAGE. – К.: НПУ ім. Драгоманова. – 2008. – 64 с.</p> <p>6. Lee J.G. Computational Materials Science: An Introduction, Second Edition (2nd ed.). – CRC Press, 2016. – 376 p.</p> <p>7. Li X.; Wang En-Ge. Computer simulations of molecules and condensed matter from electronic structures to molecular dynamics: World Scientific Publishing Company. – 2018. – 280 p.</p> <p>Допоміжна:</p> <p>8. Савчин В.П., Шувар Р.Я. Електронне перенесення в напівпровідниках та напівпровідникових структурах. – Видавничий центр ЛНУ імені І.Франка. – 2008. – 688с.</p> <p>9. Harvey Gould, Jan Tobochnik, and Wolfgang Christian. An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical System. – 2016. – 780p.</p> <p>10. Carsky P., Urban M. Ab Initio Calculations: Methods and Applications in Chemistry: Springer Berlin Heidelberg. – 2012. – 247 p.</p> <p>11. Щепанський П.А, Рудиш М.Я. Моделювання фізичних властивостей матеріалів. Методичні вказівки до лабораторних робіт : [для студ. фіз. ф-ту] / П.А.Щепанський,. – Львів : Галич-Прес, 2022. – 52 с.</p> <p>Наукові статті у періодичних виданнях за тематикою дисципліни. Додаткові матеріали також буде запропоновано для кожної теми окремо.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>12. https://en.wikipedia.org/wiki/Ab_initio_quantum_chemistry_methods</p> <p>13. https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html</p> <p>14. https://avogadro.cc/docs/</p>
Тривалість курсу	два семестри
Обсяг курсу	210 год, з яких 128 год. аудиторних занять, з них 64 год. лекцій та 64 год. лабораторних занять та 82 год. самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цього курсу студент буде:</p> <ul style="list-style-type: none"> - знати методи чисельного інтегрування та диференціювання функцій; чисельні методи рішення задач математичної фізики. основні поняття програмування, синтаксис мови програмування Python та математичного середовища SAGE та основні бібліотеки для математичних обчислень мови програмування Python (SymPy, NumPy, Matplotlib, Math, тощо); методи моделювання молекулярної динаміки та першопринципні методи розрахунку квантово-механічних систем - вміти використовувати набуті знання для розрахунку характеристик фізичних процесів і явищ на практиці; розуміти фізичні принципи явищ та процесів, які моделюються; розраховувати та аналізувати результати комп'ютерного моделювання, виходячи як з основних положень комп'ютерного моделювання, так і з емпіричних експериментальних даних; вміти використовувати для цього сучасне програмне забезпечення (мову програмування Python та математичне середовище SAGE); моделювати прості системи з атомів та молекул, а також кристалічні системи та розраховувати їх фізичні властивості за допомогою квантово-хімічних розрахунків імплементованих в пакеті GAMESS-US
Ключові слова	Математичні моделі, математичне середовище SAGE, кінетичні ефекти у напівпровідниках, молекулярна динаміка, розрахунки з перших принципів
Формат курсу	Очний
	проведення лекцій, лабораторних занять і консультації для кращого розуміння тем

Теми	Наведено у таблиці 1
Підсумковий контроль, форма	іспит у кінці 8-го семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань із загальних курсів з фізики, вищої математики, методів розв'язування диференціальних та інтегральних рівнянь, базових знань з програмування та чисельних методів.
Навчальні методи та техніки, які буде використано під час викладання курсу	лекції, презентації (ілюстрація, демонстрація), розповіді, пояснення, дискусія
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми і операційні системи, програмне середовище Python, програмний пакет GAMESS-US, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <p>7-й семестр:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лабораторні заняття: 17,5 % оцінки з курсу; максимальна кількість балів – 17,5; • контрольні заміри (модуль): 7,5 % оцінки з курсу; максимальна кількість балів – 7,5. <p>8-й семестр:</p> <ul style="list-style-type: none"> • лабораторні заняття: 25 % семестрової оцінки; максимальна кількість балів – 25; • іспит: 50 % оцінки з курсу; максимальна кількість балів – 50. <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100.</p> <p>Академічна доброчесність здобувачами вищої освіти передбачає самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання. Списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій чи усній роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів обману.</p> <p>Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов'язані дотримуватися усіх строків, визначених для виконання усіх видів робіт, передбачених курсом.</p> <p>Література. Усю література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надано викладачами виключно в освітніх цілях без права її передавання третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p>Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на практичних та поточному тестуванні. При цьому обов'язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнь на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов'язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.</p> <p>Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.</p>
Питання до екзамену (чи питання на контрольні роботи)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Переваги та недоліки мови програмування Python. Области використання. 2. Типи даних, що використовуються в Python та їх синтаксис. 3. Етапи обчислювального експерименту. Порівняння з фізичним експериментом.

	<ol style="list-style-type: none"> 4. Чисельні методи та вимоги до них при використанні у математичному моделюванні. 5. Методи для побудови 2-D та 3-D графіків у Python. Методи форматування графіків. Побудова кількох графіків в одному вікні. 6. Реалізація класів у Python. Змінна self. 7. Перколяція. Поріг перколяції на квадратній ґратці. З'єднувальний кластер. 8. Характеристики кластерів у теорії протікання для квадратної кратки. 9. Ренорм-групи. Реалізація методу ренорм-групи за запропонований Рейнольдсом. 10. Область застосування теорії протікання. 11. Бібліотека Tkinter у Python. Об'єкт Canvas. Синтаксис і застосування. 12. Математична модель руху частинки в електричних та магнітних полях. Магнітні лінзи. 13. Спеціальні методи у Python. Можливості та область використання. 14. Функція розподілу Фермі-Дірака та концентрація носіїв заряду у зоні провідності й дірок у валентній зоні напівпровідника. 15. Механізми розсіяння у напівпровідниках та їх часи релаксації. 16. Рівняння електронейтральності для власних та легованих напівпровідників. Рівень Фермі. 17. Модель температурних залежності провідності у напівпровідниках з параболічними законами дисперсії. 18. Модель залежності провідності від температури у напівпровідниках з параболічними та непараболічними законами дисперсії. 19. Система комп'ютерної математики SAGE. Програмні інтерфейси. Функціональні можливості. 20. Методи та принципи моделювання фізичних систем. 21. Рівняння руху Ньютона для N-атомної системи в методі молекулярної динаміки. 22. Схема інтегрування рівнянь руху Ньютона для N-атомної системи в методі молекулярної динаміки. 23. Алгоритм Верле. Алгоритм Верле у швидкісній формі. 24. Алгоритм предиктор-коректор в методі молекулярної динаміки. 25. Алгоритм-схема процедури молекулярної динаміки. 26. Процес врівноваження в процедурі молекулярної динаміки. 27. Методи найкрутішого спуску та спряжених градієнтів. 28. Функція радіального розподілу, її загальний вигляд для речовини в кристалічному, аморфному і рідкому станах. 29. Спрощення при розгляді n-електронної системи для розв'язання рівняння Шредінгера. 30. Загальний вигляд оператора Гамільтона для n-електронної системи. 31. Плоска хвиля, стояча хвиля. Принцип суперпозиції хвиль. 32. Основні поняття розрахунків "з перших принципів". 33. Розрахунки на основі методу Гартрі. 34. Розрахунки на основі методу Гартрі-Фока 35. Самоузгоджена процедура у методі Гартрі-Фока. 36. Теорія функціоналу густини. 37. Самоузгоджена процедура розрахунків на основі теорії функціоналу густини.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Схема курсу «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»

7-й семестр

Тиж-день	Тема занять	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1, 2	Методи та принципи моделювання фізичних систем.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 3 год.	2 тижні
3, 4	Основи методів молекулярної динаміки.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 3 год.	2 тижні
5, 6	Алгоритми інтегрування рівнянь руху у молекулярній динаміці.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 3 год.	2 тижні
7, 8	Генерування даних та опис властивостей динамічних систем.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 3 год.	2 тижні
9, 10	Теоретичні основи розгляду квантово-механічних систем.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 4 год.	2 тижні
11-13	Основи методів з перших принципів. Ранні першопринципні розрахунки.	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 8 год, самостійна робота – 4 год.	3 тижні
14-16	Розрахунки на базі теорії функціоналу густини.	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 10 год, самостійна робота – 6 год.	3 тижні

8-й семестр

Тиж-день	Тема занять	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1-3	Місце комп'ютерного експерименту у фізиці. ООП Python.	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 8 год, самостійна робота – 10 год.	2 тижні
4, 5	Методи чисельного розрахунку диференціальних рівнянь. Графіка у Python.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 6 год.	2 тижні
6, 7	Методи чисельного розв'язування ньютонівських рівнянь руху. Класи у Python.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 7 год.	2 тижні
8, 9	Задача про перколяцію. Теорія протікання.	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 10 год.	2 тижні
10-12	Статичні поля зарядів. Рух заряджених частинок в електричних та магнітних полях. Система SAGE.	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 6 год, самостійна робота – 7 год.	4 тижні
13-15	Кінетичні ефекти у напівпровідниках.	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 10 год.	3 тижні
16	Теплопровідність тонкого стержня.	Лекції – 2 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 6 год.	1 тиждень