

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 30.08.2023 р.)

Завідувач кафедри



Василь СТАДНИК

Силабус
з навчальної дисципліни
«Комп'ютерні методи моделювання фізичних процесів»,
що викладається в межах
ОПШ «Комп'ютерні технології в прикладній фізиці»
першого (бакалаврського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Львів 2023

Назва дисципліни	Комп'ютерні методи 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 – 105 Прикладна фізика та наноматеріали
Викладачі дисципліни	лектор: Демків Тарас Михайлович, професор кафедри загальної фізики, д.ф.-м.н.; лабораторні роботи проводить проф. Демків Т.М.
Контактна інформація викладачів	taras.demkiv@lnu.edu.ua
Консультації з дисципліни відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Можливі також он-лайн консультації через електронну пошту або он-лайн засобами Microsoft Teams, Telegram, Viber.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/komp-iuterni-metody-modeliuvannia-fizychnykh-protsesiv-105-prykladna-fizyka-ta-nanomaterialy-kompyuterni-tekhnologii-u-prykladniy-fizytsi
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Комп'ютерні методи моделювання фізичних процесів» є дисципліною вільного вибору для підготовки бакалавра за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали, яка викладається в VIII семестрі в обсязі 5 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Навчальна дисципліна дає навички опису складних фізичних процесів за допомогою математичного апарату, складання алгоритму вирішення завдання, перекладу алгоритму на мову програмування Python, отримання результатів за допомогою комп'ютера та проведення їх аналізу. Дисципліна сприяє розвитку навичок використання обчислювальних систем вільного доступу для вирішення професійних завдань.
Мета та цілі дисципліни	Мета: ознайомити студентів з основними поняттями і методами комп'ютерного моделювання фізичних процесів та їх застосуванням за допомогою ООП Python та математичного середовища Sage. Цілі: навчити студентів формулювати постановку задачі для комп'ютерного моделювання фізичних процесів та застосовувати методи комп'ютерного моделювання (включно з графічними) до практичних задач.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 1. Lutz M. Learning Python – Published by O'Reilly Media, Inc. – 2013. – 1320 p. 2. Крєневич А.П. Python у прикладах і задачах. Навчальний посібник: Частина 1. Структурне програмування. К.: ВПЦ "Київський Університет", 2017. – 206 с. 3. Крєневич А.П. Python у прикладах і задачах. Навчальний посібник: Частина 2. Об'єктно-орієнтоване програмування – К.: ВПЦ "Київський Університет", 2020. – 152 с. 4. Васильєв А. Програмування мовою Python. – Навчальний посібник. – Богдан. – 2018. – 504 с.

	<p>5. Barry P. Head First Python (2nd Edition). – All IT books. – 2016. – 624 p.</p> <p>6. https://uk.wikibooks.org/wiki/Підручник_мови_Python/Неформальний_вступ_до_мови_Python.</p> <p>7. Шокалюк С.В. Основи роботи в SAGE. – К.: НПУ ім. Драгоманова. – 2008. – 64 с.</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. – 688 с.</p> <p>9. Gould H., Tobochnik J., Christian W. An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical System. – 2016. – 780 p.</p> <p>10. Програмування числових методів мовою Python : навч. посіб. / А. Ю. Дорошенко, С. Д. Погорілий, Я. Ю. Дорогий, Є. В. Глушко ; за ред. А. В. Анісімова. – К. : Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2013. – 463 с.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>1. https://pythonguide.rozh2sch.org.ua/</p> <p>2. https://docs.python.org/</p> <p>3. https://wiki.python.org</p> <p>4. http://www.wikipedia.org</p> <p>5. http://docs.scipy.org/</p>
Тривалість дисципліни	один семестр
Обсяг дисципліни	150 год, з яких 64 год аудиторних занять, з них 32 год лекцій та 32 год. лабораторних занять та 86 год. самостійної роботи
Очікувані результати навчання	<p>Після завершення цієї дисципліни студент буде:</p> <p>знати:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) методи чисельного інтегрування та диференціювання функцій; 2) чисельні методи розв'язування задач математичної фізики; 3) основні поняття програмування; 4) синтаксис мови програмування Python; 5) синтаксис математичного середовища SAGE; 6) основні бібліотеки для математичних обчислень мови програмування Python (SymPy, NumPy, Matplotlib, Math тощо); <p>вміти:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) використовувати набуті знання для розрахунку характеристик фізичних процесів і явищ на практиці; 2) розуміти фізичні принципи явищ та процесів, які моделюються; 3) розраховувати та аналізувати результати комп'ютерного моделювання, виходячи як з основних положень комп'ютерного моделювання, так і з емпіричних експериментальних даних; 4) вміти використовувати для цього сучасне програмне забезпечення (мову програмування Python та математичне середовище SAGE).
Ключові слова	Python, математичні моделі, математичне середовище SAGE, кінетичні ефекти у напівпровідниках
Формат дисципліни	очний
Теми	Наведено у табл. 1
Підсумковий контроль, форма	Залік у кінці семестру.

Пререквізити	Для вивчення дисципліни студенти потребують базових знань із дисциплін загальної фізики, «Матаналіз», «Аналітична геометрія», «Обчислювальна техніка і програмування», «Диференціальні та інтегральні рівняння», «Об'єктно-орієнтоване програмування», «Чисельні методи».
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	лекції, презентації (ілюстрація, демонстрація), виконання лабораторних робіт, розповіді, пояснення, дискусія
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, загальноживані комп'ютерні програми і операційні системи, програмне середовище Python, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • робота на лабораторних заняттях під час семестру – 90 % сумарної оцінки. Максимальна кількість балів 90: <ul style="list-style-type: none"> • максимальна оцінка для лабораторних робіт № 2, 3, 5, 7, 8 – 10 балів, градація оцінювання відповідно до такої шкали: <ul style="list-style-type: none"> • виконання лабораторної роботи – 3 бали; • правильне оформлення звіту – 2 бали; • захист лабораторної роботи – 5 балів з наступною градацією: <ul style="list-style-type: none"> • 5 – студент повністю володіє матеріалом; • 4 – студент добре володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1-3 – студент частково володіє матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом; • максимальна оцінка для лабораторної роботи № 1, 4 – 15 балів: <ul style="list-style-type: none"> • виконання лабораторної роботи – 5 балів, • правильне оформлення звіту – 2 бали, • захист лабораторної роботи – 8 балів з наступною градацією: <ul style="list-style-type: none"> • 8 – студент повністю володіє матеріалом; • 6, 7 – студент добре володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1-5 – студент частково володіє матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом; • лабораторної роботи № 6, 9 – максимальна оцінка – 5 балів: <ul style="list-style-type: none"> • виконання лабораторної роботи – 1 бал, • правильне оформлення звіту – 1 бал, • захист лабораторної роботи – 3 бали з наступною градацією: <ul style="list-style-type: none"> • 3 – студент повністю володіє матеріалом; • 2 – студент добре володіє матеріалом, є незначні помилки; • 1 – студент частково володіє матеріалом; • 0 – студент не володіє матеріалом; • робота на лекціях (тестове опитування лекційного матеріалу по 2-х змістових модулях в кінці семестру) – 10 % семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 10. <ul style="list-style-type: none"> • Всі тестові запитання мають однакову вагу. Сумарна кількість балів за пройдений тест прямопропорційна до числа правильних відповідей. <p>Невиконана студентом лабораторна робота оцінюється в 0 балів. Підсумкова максимальна кількість балів – 100. 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 лабораторні 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 дисципліною.</p> <p>Література. Усю літературу, 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 лабораторних 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 та ін.</p> <p>Додаткові бали можна отримати за результатами неформального та/або інформального навчання по тематиці даного курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання відбувається у відповідності до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання.</p> <p>Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.</p>
<p>Питання до модульних контролів (замірів знань)</p>	<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. 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 ґратки. 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. Система комп'ютерної математики SAGE. Програмні інтерфейси. Функціональні можливості. 15. Функція розподілу Фермі-Дірака та концентрація носіїв заряду у зоні провідності й дірок у валентній зоні напівпровідника. 16. Механізми розсіяння у напівпровідниках та їх часи релаксації. 17. Рівняння електронейтральності для власних та легованих напівпровідників. 18. Модель температурної залежності провідності рівня Фермі у власних напівпровідниках. 19. Модель температурної залежності провідності рівня Фермі у власних напівпровідниках з домішками.
<p>Опитування</p>	<p>Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенні дисципліни.</p>

Схема курсу «Комп'ютерні методи моделювання фізичних процесів»

Тиж-день	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Література	Термін виконання
Змістовий модуль 1. Принципи математичного моделювання. Основи Python				
1-3	Тема 1. Місце комп'ютерного експерименту у фізиці. ООП Python	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 8 год, самостійна робота – 14 год.	Базова: 1, 4, 6	3 тижні
4, 5	Тема 2. Методи розрахунку диференціальних рівнянь	Лекції – 3 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 1, 4, 5; Допоміжна: 9	1,5 тижнів
5-7	Тема 3. Методи чисельного розв'язування ньютонівських рівнянь руху. Класи у Python	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 2-4; Допоміжна: 9	2 тижні
7-9	Тема 4. Задача про перколяцію. Теорія протікання	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 12 год.	Базова: 1-3; Допоміжна: 8	2 тижні
Змістовий модуль 2. Математичне моделювання за допомогою Python. Математичне середовище Sage				
9-10	Тема 5. Система комп'ютерної алгебри Sage	Лекції – 3 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 9 год.	Базова: 1-3, 7	1,5 тижнів
11, 12	Тема 6. Статичні поля зарядів. Рух заряджених частинок в електричних та магнітних полях	Лекції – 4 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 10 год.	Базова: 2, 3, 7; Допоміжна: 10	2 тижні
13-15	Тема 6. Кінетичні ефекти у напівпровідниках	Лекції – 6 год, лаб. заняття – 4 год, самостійна робота – 12 год.	Базова: 2-5, 7; Допоміжна: 8, 9	3 тижні
16	Тема 7. Розв'язок диференціальних рівнянь з декількома незалежними змінними	Лекції – 2 год, лаб. заняття – 2 год, самостійна робота – 9 год.	Базова: 2-4, 7; Допоміжна: 10	1 тиждень