

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра фізики кристалів

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан фізичного факультету
Руслан БОВК

“ ” 2025 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спецпрактикум «Комп’ютерне моделювання фізичних процесів і явищ»
(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____ другий (магістерський)
галузь знань _____ Е – природничі науки
(шифр і назва)
спеціальність _____ Е5 – фізика та астрономія
(шифр і назва)
освітня програма _____ освітньо-професійна фізика
(шифр і назва)
спеціалізація _____
(шифр і назва)
вид дисципліни _____ обов’язкова
(обов’язкова / за вибором)
факультет _____ фізичний

2025/2026 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

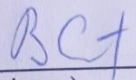
29 серпня 2025 року, протокол № 10

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ: Гончаренко А.В., канд. фіз.- мат. наук, доцент
кафедри фізики кристалів

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики кристалів

Протокол №9 від 22 серпня 2025 року

В.о. завідувача кафедри:



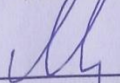
(підпис)

Владислав СЕМІНЬКО
(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол №5 від 28 серпня 2025 року

Голова методичної комісії



(підпис)

Микола МАКАРОВСЬКИЙ
(прізвище та ініціали)

Програма навчальної дисципліни “Комп’ютерне моделювання фізичних процесів і явищ” складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки магістра

спеціальності 104 – фізика та астрономія

Предметом вивчення навчальної дисципліни є типові математичні моделі фізичних процесів та явищ і їх комп’ютерна реалізація.

1. Опис навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни є: ознайомити студентів з основними підходами до комп’ютерного моделювання фізичних систем, які описуються математичними рівняннями, що не можна точно розв’язати, сформувати практичні навички постановки та розв’язання відповідних задач.

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

знати: основні методи моделювання динамічних фізичних систем, систем, які описуються диференційними рівняннями у часткових похідних.

вміти: моделювати динаміку систем багатьох частинок методами молекулярної динаміки; систем, які описуються диференційними рівняннями у часткових похідних, методами кінцевих різниць та кінцевих елементів; досліджувати стійкість рішення.

Кількість кредитів – 6.

Загальна кількість годин – 180.

Характеристика навчальної дисципліни	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
5-й	-й
Семестр	
10-й	-й

Лекції	
24 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
36 год.	год.
Самостійна робота	
120 год.	год.
Індивідуальні завдання	
год.	

Форма контролю – залік.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Тема 1. Можливості і обмеження комп'ютерного моделювання фізичних процесів.

Тема 2. Числове розв'язання диференціальних рівнянь у часткових похідних. Методи кінцевих різниць та кінцевих елементів. Стійкість рішення.

Тема 3. Моделювання динаміки систем багатьох частинок. Близькодія та далекодія. Методи молекулярної та дискретної дислокаційної динаміки. Крайові та граничні умови. Визначення макроскопічних величин. Хаотичний рух динамічних систем. Ентропія та наближення до рівноваги. Методи Монте-Карло.

Тема 4. Керування вимірювальними приладами та обробка результатів фізичного експерименту.

Тема 5. Обчислювальна складність комп'ютерних моделей. Методи розпаралелювання обчислень.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин											
	Денна форма					Заочна форма						
	Усього	у тому числі					Усьо го	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср		л	п	лаб	інд	ср

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Тема 1.	19	2				17						
Тема 2.	44	6		12		26						
Тема 3.	55	4		14		37						
Тема 4.	32	4		4		24						
Тема 5.	30	8		6		16						
Разом	180	24		36		120						

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Виникнення випадковостей при моделюванні динаміки класичних динамічних систем	17
2	Аналіз стійкості кінечно-різницевих схем для рівняння теплопровідності	26
3	Відмінності моделювання динаміки систем багатьох частинок з близькодією та з далекодією	37
4	Оптимізація алгоритмів для їх ефективного розпаралелювання	24
5	Застосування методів машинного навчання для аналізу експериментальних даних.	16
	Разом	120

6. Варіанти завдань для розрахунково-графічної роботи

Варіант №1

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$\square u \square \square_{x^2} u_2$ на інтервалі $\square_0^1 \square_0^1 \square t \square \square_0^1 \square x \square \square_0^1$

$\square t \square \square$
Початкові умови $u(t \square 0, x) \square \sin \square x$

$\square u(t, x \square 0) \square 2$

Граничні умови $\square \square u(t, x \square 1) \square 2(\square t)$

$$\square \sin$$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t,x)$

Варіант №2

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$$\square u - \square_x^2 u = \square \sin^2 \square t \quad \text{на інтервалі } \square_0 \leq x \leq 1$$

$$\square t \leq \square_{x_2} \quad \square_0 \leq t \leq 10$$

Початкові умови $u(t \leq 0, x) \leq 0$

$$\square u(t, x \leq 0) \leq \sin^2(\square t)$$

Граничні умови $\square \square u(t, x \leq 1) \leq \sin^2(\square t) \cos^2(\square t)$ Результат

подати у вигляді поверхні $u(t,x)$

Варіант №3

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$$\square u \leq \square_x^2 u \quad \text{на інтервалі } \square_0 \leq x \leq 1$$

$$\square t \leq \square_{x_2} \quad \square_0 \leq t \leq 10$$

Початкові умови $u(t \leq 0, x) \leq \sin \square x$

$$\square u(t, x \leq 0) \leq \sin^2 \square t \leq \cos^2 2 \square t$$

Граничні умови $\square \square u(t, x \leq 1) \leq 2 \square t$

$$\square \sin$$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t,x)$

Варіант №4

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t,x)$)

$\Delta u = \Delta_2 u$ на інтервалі $0 \leq x \leq 1$

$0 \leq t \leq 10$

Початкові умови $u(t=0, x) = x$
 $\Delta u(t, x=0) = \sin^2 t$

Граничні умови $\Delta u(t, x=1) = \cos^2 t$

Результат
 подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №5

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\Delta u = \Delta_2 u$ на інтервалі $0 \leq x \leq 1$

$0 \leq t \leq 6$

Початкові умови $u(t=0, x) = \sin^2 x - x^2$
 $\Delta u(t, x=0) = \sin^2 2t$

$\Delta u(t, x=1) = \sin^2 2t$

Граничні умови $\Delta u(t, x=1) = \cos^2 2t$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №6

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$\Delta u = \Delta_2 u$ на інтервалі $0 \leq x \leq 1$

$0 \leq t \leq 6$

$\Delta u(t, x=1) = \cos^2 2t$

Початкові умови

$$u(t=0, x) = \sin^2 \frac{\pi}{2} x$$

$$u(t, x=0) = \sin^2 \frac{\pi}{2} t$$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Граничні умови

$$u(t, x=1) = 0$$

$$u(t, x=0) = 0$$

Варіант №7

Розв'язати диференціальне рівняння

(знайти функцію $u(t, x)$)

Початкові умови

$$u(t=0, x) = \sin^2 \frac{\pi}{2} x$$

на інтервалі $0 \leq t \leq 10$

$$u(t, x=0) = \sin^2 \frac{\pi}{2} x$$

$$t \in [0, 10]$$

$$0 \leq x \leq 1$$

$$u(t, x=1) = 0$$

$$u(t, x=1) = \cos^2 \frac{\pi}{2} t$$

Граничні умови

$$u(t, x=0) = 0$$

$$u(t, x=1) = 0$$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

Варіант №8

Розв'язати диференціальне рівняння (знайти функцію $u(t, x)$)

$$0 \leq t \leq 10$$

$$0 \leq t \leq 10$$

$$u(t, x=0) = \sin^2 \frac{\pi}{2} t$$

Початкові умови

$$u(t=0, x) = x$$

на інтервалі $0 \leq x \leq 1$

$$u(t, x=0) = \sin^2 \frac{\pi}{2} t$$

$$u(t, x=1) = 0$$

$$0 \leq t \leq 10$$

Граничні умови

$$u(t, x=0) = 0$$

$$u(t, x=1) = \cos^2 \frac{\pi}{2} t$$

Результат подати у вигляді поверхні $u(t, x)$

7. Методи контролю Форма

контролю – залік.

Приклади завдань:

Варіант №1

Промодельовати динаміку частинок двохвимірною ідеального газу у посуді із пружними стінками.

Взяти 10 – 15 частинок і малювати траєкторії їх руху, доки з кожною не відбудеться 5 – 6 зіткнень з іншими частинками. Потім “звернути” час та слідкувати за рухом частинок той саме час, що й спочатку.

За початкові умови взяти випадкові координати частинок та їх швидкості.

Варіант №2

Промодельовати динаміку частинок двохвимірною ідеального газу у посуді із пружними стінками.

Взяти не менше 100 частинок та моделювати їх рух у посуді. Малювати графік розподілу частинок за швидкостями.

За початкові умови взяти випадкові координати частинок та їх швидкості.

Варіант №3

Промодельовати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$b \approx 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, _____ $\approx 4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$.

$\approx (1 \cdot \dots)$

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $v_{\text{glide}} \approx 2 \cdot 10^3 f$, швидкість переповзання $v_{\text{climb}} \approx 8 \cdot 10^4 f$.

Задати початкові умови:

В нескінченному кристалі є 4 полоси ковзання довжиною 100 мкм кожна, відстань поміж полосами 30 мкм. В кожній полосі однакова кількість дислокацій (не менше 20), що розташовані випадково. Ширина полоси 1 мкм. Промодельовати початкову стадію процесу полігонізації.

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №4

Промодельовати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$$b = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad \mu = 4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2.$$

$$\nu(1 \text{ Гц})$$

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $v_{\text{glide}} = 2 \cdot 10^3 f$, швидкість переповзання $v_{\text{climb}} = 8 \cdot 10^4 f$.

Задати початкові умови:

У напівнескінченному кристалі, що обмежений однією вільною поверхнею $x=0$, є 5 полос ковзання довжиною 100 мкм кожна, відстань поміж полосами 30 мкм. В кожній полосі однакова кількість дислокацій (не менше 20), що розташовані випадково. Ширина полоси 1 мкм. Промодельовати початкову стадію процесу полігонізації.

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №5

Промодельовати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$$b = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad \mu = 4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2.$$

$$\nu(1 \text{ Гц})$$

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $v_{\text{glide}} = 2 \cdot 10^3 f$, швидкість переповзання $v_{\text{climb}} = 8 \cdot 10^4 f$.

Задати початкові умови:

В нескінченному кристалі є 4 дислокаційні стінки (малокутові границі)

довжиною 150 мкм кожна, що складаються з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = b \cdot (b, 0, 0)$, відстань поміж стінками 30 мкм. Посередині їх перетинає одна $\rightarrow$ дислокаційна стінка, що складається з дислокацій з вектором Бюргерса $b \cdot (0, b, 0)$. Дислокації в стінках розташовані на однакових відстанях поміж собою. В кожній стінці однакова кількість дислокацій (не менше 20).

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

Варіант №6

Промоделювати динаміку дислокаційного ансамблю у монокристалі із наступними параметрами:

$$b = 3 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad \mu = 4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, \\ \nu = (1 \cdot 10^{-4} \text{ с})$$

Вважати, що при високих температурах, невеликому рівні напружень та не в дуже чистих кристалах швидкість дислокації пропорційна силі, що на неї діє. Швидкість ковзання $v_{\text{glide}} = 2 \cdot 10^{-3} f$, швидкість переповзання $v_{\text{climb}} = 8 \cdot 10^{-4} f$.

Задати початкові умови:

В нескінченному кристалі є 3 дислокаційні стінки (малокутові границі) довжиною 150 мкм кожна, що складаються з дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = b \cdot (b, 0, 0)$, відстань поміж стінками 30 мкм. Посередині їх перетинає одна $\rightarrow$ дислокаційна стінка, що складається з дислокацій з вектором Бюргерса $b \cdot (0, b, 0)$. Дислокації в стінках розташовані на однакових відстанях поміж собою. В кожній стінці однакова кількість дислокацій (не менше 20).

Систему обмежити прямокутними стінками, які дислокації не можуть подолати, зручного розміру (розмір екрана, вікна, робочого поля).

Результат подати у вигляді послідовності характерних картин розподілу дислокацій на різних етапах процесу. Масштаби по осі x та y можуть відрізнятись.

8. Схеми нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання							Сума
T1	T2	T3	T4	T5	Розрахунковографічна робота	Залік	100
30					30	40	

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	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

1. H. Gould, Jan Tobochnik, W. Christian, An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems, Pearson Addison Wesley, 2007
2. C. Beisbart, N. J. Saam, Computer Simulation Validation: Fundamental Concepts, Methodological Frameworks, and Philosophical Perspectives, Springer, 2019
3. J. Lenhard, Calculated Surprises: A Philosophy of Computer Simulation, Oxford University Press, 2019
4. F. Neelamkavil, Computer Simulation and Modelling, Wiley, 1987
5. C.R.A. Catlow, Computer Modeling in Inorganic Crystallography, Elsevier, 1997
6. A. L. Garcia, Numerical Methods for Physics, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015
7. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 2007