

Рабочая программа дисциплины «Численные методы» составлена на основании программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.3.1 Физика космоса, астрономия, 1.3.3 Теоретическая физика, 1.3.5 Физическая электроника, 1.3.6 Оптика, 1.3.8 Физика конденсированного состояния, 1.3.9 Физика плазмы, 1.3.11 Физика полупроводников, 1.4.4 Физическая химия (далее – программа аспирантуры)

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями изучения дисциплины являются:

- получение углубленных знаний по теории и практике применения численных методов в физике;
- приобретение опыта использования численных методов для исследовательских целей, а также при решении типовых задач постановки экспериментов и анализа полученных результатов.

Задачи дисциплины заключаются в изучении фундаментальных понятий, теорий, относящихся к численным методам, а также включают изучение ряда разделов математики и математической физики.

Для достижения поставленных задач используется набор методических средств: учебная, учебно-методическая литература, информационные ресурсы библиотек.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ

2.1. Дисциплина «Численные методы в физике» входит в обязательную часть образовательного компонента программы аспирантуры.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ФТИ им. А.Ф. Иоффе, прошедших обучение по программе подготовки магистров, прослушавших соответствующие курсы математического анализа и теоретической физики. Она основывается на положениях, отраженных в учебных программах указанных уровней.

2.3. Дисциплина «Численные методы в физике» нацелена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена и защите диссертации.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины «Численные методы в физике» направлен на формирование перечисленных ниже компетенций в соответствии с Программой подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научным специальностям:

3.1. Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерирование новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

3.2. Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-2).

3.3. Профессиональные компетенции:

- способность формулировать задачи экспериментальных исследований, моделировать, планировать и реализовывать постановку экспериментов, направленных на решение поставленных задач (ПК-1);
- способность анализировать и систематизировать научно-техническую информацию о новых разработках систем автоматизации физического эксперимента (ПК-2);
- способность организовывать разработку систем автоматизации физического эксперимента (ПК-3);
- способность к компьютерному моделированию (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны

знать:

- основные методы перехода от математической модели к численной, в том числе с неопределенностями как в данных, так и моделях, теоретические подходы при их рассмотрении,
- основные техники численного решения алгебраических и трансцендентных урав-

нений, обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных;

уметь:

- поставить задачу численного решения конкретной проблемы, если она того требует, определить начальные и граничные условия,

- провести обработку результатов исследования, обеспечив правильную их интерпретацию и необходимую точность;

- владеть опытом:

- подготовки исходных данных, выбора типа инструмента для решения задачи, а также способа обработки результатов, необходимых для получения требуемой точности;

- получения содержательной и достоверной информации в процессе решения и по его завершении;

- самостоятельного изучения и анализа специальной научной и методической литературы, связанной с численными методами в физике.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

Приводимая ниже таблица показывает распределение учебного времени, отводимого на освоение разделов курса, согласно учебному плану в 1 и 2 семестрах.

4.2. Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование разделов и тем	Трудоемкость (в ЗЕТ)	Объем работы (в часах)	Всего учебных занятий (в часах)			
			лекции	Лаб. / практ	самостоятельная работа	кон- троль
Раздел 1. Введение в численные методы						
Тема 1.1 Моделирование: физическое, математическое и численное			4		1	
Тема 1.2 Решение алгебраических и трансцендентных уравнений.			2		1	
Тема 1.3 Системы линейных алгебраических уравнений, матрицы			8		1	
Тема 1.4 Задачи оптимизации			4		1	
Всего по разделу	0,6	22	18		4	
Раздел 2. Обратные задачи и интервальный анализ						

Тема 2.1 Интервальный анализ. Базовые понятия, определения, объекты.			4		2	
Тема 2.2 Методы решения интервальных линейных задач, нелинейных уравнений и их систем.			12		0	
Тема 2.3 Обратные задачи. Понятие корректных и некорректных задач, идеи и методы регуляризации.			8		6	
Тема 2.4 Основные понятия статистики данных с интервальной неопределенностью			4		4	
Тема 2.5 Методы обработки выборок интервальных данных			4		1	
Тема 2.6 Восстановление зависимостей по выборкам интервальных данных.			4		1	
Всего по разделу	1,4	50	36		14	
Всего по дисциплине	2	72	54		18	за- чет

4.3. Содержание разделов и тем

Раздел 1. Введение в численные методы

Тема 1.1. Моделирование: физическое, математическое и численное.

Иерархия моделей: многофизичность и многомасштабность. Введение в численное моделирование: отличие эксперимента от численного расчёта, понятие дискретизации, корректность численного расчёта и возможные «артефакты», необходимость верификации и валидации. Примеры задач, решаемых при помощи численного моделирования. Использование суперкомпьютеров для различных задач физики, прогнозы по использованию суперкомпьютеров в будущем, необходимость использования «редуцированных» моделей. Переход от математической модели к численной. Верификация и валидация. Корректность и устойчивость численной схемы. Виды погрешностей (абсолютная и относительная). Методы представления чисел в компьютере. Машинная арифметика чисел с плавающей точкой.

Тема 1.2. Решение алгебраических и трансцендентных уравнений.

Основные этапы решения алгебраических и трансцендентных уравнений. Итерационные методы: метод бисекций, метод простой итерации, метод Ньютона. Итерационные методы решений систем алгебраических и трансцендентных уравнений.

Тема 1.3. Системы линейных алгебраических уравнений, матрицы

Системы линейных алгебраических уравнений, типы матриц (плотная и разреженная). Примеры задач, приводящих к появлению СЛАУ. Прямые методы решения СЛАУ (метод Гаусса, нахождение обратных матриц, метод Крамера, LU разложение). Метод прогонки. Понятие числа обусловленности матрицы. Разреженные матрицы. Простейшие итерационные методы (Якоби, Гаусса-Зейделя). Крыловские методы (сопряжённых градиен-

тов, минимизации обобщённых невязок). Примеры применения, оценка скорости сходимости. Многосеточные методы для решения СЛАУ, возникающей при дискретизации уравнения типа Пуассона. Построение сеток на грубых уровнях, методы агломерации ячеек. Пролонгация и рестрикция, V и W циклы. Примеры. Проблемы параллелизации. Методы отыскания собственных чисел и собственных векторов матрицы.

Тема 1.4. Задачи оптимизации

Обусловленность задач на поиск минимума/максимума функции одной и многих переменных. Прямые методы поиска минимума функции одной переменной. Методы минимизации гладких функций. Методы многомерной оптимизации. Понятие рельефа функции. Методы спуска и методы с использованием производных. Методы глобального поиска, адаптивный случайный поиск. Многокритериальный поиск, определение оптимальности по Парето, фронт Парето. Генетические алгоритмы. Многоуровневая оптимизация. Примеры.

Раздел 2. Обратные задачи и интервальный анализ

Тема 2.1. Интервальный анализ. Базовые понятия, арифметика, интервальное обобщение векторов и матриц. Обобщение понятие множества решений задач в различных постановках.

Введение в интервальный анализ. Интервальные арифметики. Интервальные векторы и матрицы. Неособенные интервальные матрицы. Интервальное оценивание областей значений функций

Тема 2.2. Методы решения интервальных линейных задач, нелинейных уравнений и их систем. Методы оценивания областей значения интервально заданных функций и интервальной оптимизации. Нелинейные уравнения. Интервальный метод Ньютона. Метод Кравчика. Теория и практические примеры интервальной регуляризации плохообусловленных задач.

Постановки интервальных задач. Множества решений интервальных задач. Линейная задача о допусках. Интервальная регуляризация. Внешнее оценивание объединённого множества решений. Итерационные методы. Предобуславливание. Формальные решения. Методы интервальной оптимизации.

Тема 2.3. Обратные задачи. Понятие корректных и некорректных задач, идеи и методы регуляризации. Методы решения обратных линейных задач. Базовые задачи томографии. Введение в обратные задачи. Типы обратных задач. Корректные и некорректные задачи. Идея регуляризации. Методы регуляризации. Обратные линейные задачи. Обратные линейные задачи интегральной геометрии.

Тема 2.4. Основные понятия статистики данных с интервальной неопределённостью. Математический аппарат. Арифметики Каухера и Кэхэна. Составные интервальные

объекты. Связь с теоретико-вероятностной статистикой и другими областями анализа данных.

Тема 2.5. Методы обработки выборок интервальных данных. Описание совместимости выборки. Интервальные характеристики выборки. Мода, медиана, индекс Жаккара, минимум и максимум по включению, варьирование неопределенности.

Тема 2.6. Восстановление зависимостей по выборкам интервальных данных. Различные постановки задач. Совместимость функциональной зависимости, информационное множество, коридор совместных зависимостей. Статус результата измерений, выбросы. Варьирование величины неопределенности результатов измерений.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Технология процесса обучения по дисциплине «Численные методы в физике» включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- а) аудиторные занятия (лекционно-семинарская форма обучения);
- б) самостоятельная работа студентов;
- в) контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончании;
- г) зачет по окончании изучения дисциплины.

В учебном процессе используются как активные, так и интерактивные формы проведения занятий: дискуссия, метод поиска быстрых решений в группе, мозговой штурм.

Аудиторные занятия проводятся в интерактивной форме с использованием мультимедийного обеспечения (ноутбук, проектор) и технологии проблемного обучения.

Презентации позволяют качественно иллюстрировать практические занятия схемами, формулами, чертежами, рисунками. Кроме того, презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Электронная презентация дает возможность отобразить процессы в динамике, что позволяет улучшить восприятие материала.

Самостоятельная работа организована в соответствии с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы;
- поиск научно-технической информации в открытых источниках с целью анализа и выявления ключевых особенностей.

Основные аспекты применяемой технологии проблемного обучения:

- постановка проблемных задач отвечает целям освоения дисциплины «Численные методы в физике» и формирует необходимые компетенции;

- решаемые проблемные задачи стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Цель контроля – получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

6.1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляется на протяжении семестра. Текущий контроль знаний аспирантов организован путем выступления на семинарах.

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, развитие практических умений.

6.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация завершает изучение дисциплины «Численные методы в физике». Форма аттестации - зачет в письменной или устной форме.

На зачете аспирант должен продемонстрировать высокий научный уровень и знания по дисциплине «Численные методы в физике».

Перечень контрольных вопросов:

Раздел 1.

1. К какому этапу проверки численной методики можно отнести исследование по определению порядка аппроксимации численной схемы?
2. К какому этапу проверки численной методики можно отнести сравнение с экспериментальными данными?
3. К какому этапу проверки численной методики можно отнести сравнение с аналитическим решением?
4. Какому условию (условиям) должна удовлетворять математическая модель?
5. Для каких целей может быть сформулирована математическая модель, не соответствующая (частично или полностью) физической модели?
6. Для каких целей может проводиться редуцирование физической модели?
7. Чем отличаются термины «многомасштабность» и «многофизичность»?
8. В каких случаях численная модель даёт эффекты, не предсказываемые математической моделью?

9. Перечислите возможные причины расхождения результатов численного расчёта и физического эксперимента.
10. В каком случае каноническое определение относительной погрешности величины неприменимо?
11. Какие способы уменьшения неустранимой погрешности вы можете предложить?
12. Перечислите способы уменьшения погрешности аппроксимации.
13. Каким образом можно уменьшить вычислительную погрешность?
14. Для каких целей может применяться арифметика «длинных» чисел?
15. Какие операции над вещественными числами с плавающей точкой могут приводить к потере точности?
16. К каким результатам приведут следующие операции над вещественными числами с плавающей точкой (по стандарту IEEE): $10/0$, $-100/0$.
17. К каким результатам приведут следующие операции над вещественными числами с плавающей точкой (по стандарту IEEE): $0/0$, $\sqrt{-2}$.
18. Что может означать расходимость в процессе численного расчёта?
19. Какой метод нахождения корня уравнения $f(x) = 0$ можно применять в случае, если функция $f(x)$ непрерывна, но недифференцируема?
20. Какой метод нахождения корня уравнения $f(x) = 0$ целесообразней в случае, если функция $f(x)$ не задана аналитически?
21. Какой метод, из рассмотренных, имеет квадратичный порядок скорости сходимости?
22. До каких пор возможно уточнять корень уравнения численным методом?
23. Что необходимо сделать, прежде чем определить корень уравнения выбранным методом?
24. Какой метод однозначно неприменим для нахождения кратного корня?
25. Какие (численные) сложности возникают при решении систем алгебраических/трансцендентных уравнений методом Ньютона?
26. Какова скорость сходимости метода релаксации?
27. Для каких функций $f(x)$ метод Ньютона может быть реализован без особых затруднений?
28. В каком случае метод половинного деления гарантированно сходится?
29. Матрица какого вида получается при дискретизации уравнения теплопроводности по методу конечных разностей?
30. В каких случаях может возникать плотная матрица?
31. В каком случае решение СЛАУ существует и единственно?

32. Матрица называется вырожденной, если ...
33. Что означает термин «матрица с диагональным преобладанием»?
34. Как называется матрица, для которой все элементы, расположенные ниже главной диагонали, равны 0?
35. Напишите определение симметричной матрицы.
36. Как называется матрица, каждый элемент которой также представляет собой матрицу?
37. Какой метод нахождения решения СЛАУ является наиболее вычислительно затратным?
38. Что означает «СЛАУ с сильно разреженной матрицей»?
39. Какие существуют критерии сходимости итерационных методов?
40. Какой из итерационных методов обладает свойством сглаживания невязки?
41. Для каких матриц методы Якоби и Гаусса-Зейделя гарантированно сходятся?
42. Какие основные операции с векторами и матрицами необходимо производить при реализации методов Крыловского типа?
43. Назовите один из наиболее быстрых итерационных методов нахождения решения СЛАУ с симметричной матрицей.
44. Для чего необходимо предобуславливание СЛАУ?
45. Назовите простейшие предобуславливатели, не требующие предварительной подготовки для их нахождения.
46. В чём отличие неполного LU-разложения от полного?
47. Как растут вычислительные затраты при применении многосеточных методов с ростом числа ячеек (размерности вектора неизвестных)?
48. Какой метод в основном применяется для сглаживания высокочастотной составляющей поля невязок на разных сетках многосеточного алгоритма?
49. Какова основная идея многосеточного алгоритма?
50. Какие есть методы составления матрицы на грубом уровне многосеточного алгоритма?
51. Что такое V-цикл в многосеточном алгоритме?
52. Что такое «алгоритм агломерации»?

Раздел 2.

53. Произведение и деление в классической интервальной арифметике.
54. Типы интервалов. Таблица Кэли для классической интервальной арифметики.

55. Особенности интервальной арифметики. Вычитание и деление объекта из себя и на себя.
56. Монотонность по включению.
57. Связанные и несвязанные интервальные величины.
58. Основная теорема интервальной арифметики. Дерево Канторовича.
59. Характеристики интервалов и их свойства. Расширение (обинтерваливание) объекта.
60. Пример недистрибутивности умножения относительно сложения.
61. Свойства середины и радиуса интервала.
62. Метрика и топология на множествах интервалов.
63. Интервальная оболочка.
64. Действия над интервальными матрицами. Свойства середины и радиуса при сложении и умножении.
65. Нормы интервальных векторов и матриц.
66. Сжимающие отображения. Теорема Шредера о неподвижной точке.
67. Неособенные интервальные матрицы. Интервальный признак Адамара. Критерий Баумана.
68. Признаки неособенности Бека и Румпа. Матрицы Ноймаера.
69. Сильно неособенные интервальные матрицы.
70. Обратные интервальные матрицы. Пример 2×2 .
71. Итерационный метод Шульца для обращения матриц.
72. М-матрицы. Линейное уравнение межотраслевого баланса (уравнение Леонтьева).
73. Интервальные Н-матрицы. Компарант матрицы.
74. Интервальное оценивание областей значений функций. Оптимальное интервальное расширение точечной функции.
75. Качество внешнего интервального оценивания области значений функции - полиномы.
76. Липшицевские оценки. Таблица.
77. Центрированные формы интервальных оценивающих функций.
78. Дифференциальная центрированная форма интервального расширения (оценка по Лагранжу).
79. Оценка по наклону. Соотношение оценки по наклону и дифференциальной центрированной формой интервального расширения.

80. Нелинейные интервальные уравнения. Интервальный метод Ньютона. Интервальный оператор Ньютона.
81. Случай нульсодержащего интервала для производной.
82. Многомерный интервальный метод Ньютона – пример.
83. Метод Кравчика. Оператор Кравчика на интервале.
84. Метод Кравчика – пример. Пересечение кривых под углом.
85. Случай близкий к касанию кривых. Сравнение методов Ньютона и Кравчика.
86. Методы интервальной оптимизации.
87. Постановки интервальных задач. Множества решений интервальных задач.
88. Возникновение интервальнозначных данных.
89. Нечеткие множества и нечеткие числа.
90. Твины. Мультиинтервалы.
91. Оценки точечные и интервальные.
92. Накрывающие и ненакрывающие результаты измерений.
93. Совместность выборки. Граф совместности.
94. Мера Жаккара.
95. Информационное множество.
96. Вариабельность.
97. Мода и медиана интервальной выборки.
98. Варьирование интервальной неопределенности. Метод Оскорбина.
99. Восстановление зависимостей по выборкам интервальных данных. Постановка задачи.
100. Совместность линейной функциональной зависимости
101. Информационное множество и коридор совместных зависимостей
102. Случай точечных входных переменных
103. Статус результата измерений. Выбросы
104. Варьирование величины неопределенности результатов измерений
105. Классы задач математической физики.
106. Связь параболических и гиперболических задач. Тэта-функции.
107. Криволинейные системы координат.
108. Эллиптические функции Якоби и Вейерштрасса.
109. Мультифизика. Движение заряженных частиц в газе при высоком давлении.
110. Вариационное исчисление. Кратчайшие линии на поверхностях.
111. Принцип Ферма. Постановки вариационных задач.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Основная литература

1. Распопов В.Е., Клунникова М.М. Лекции по курсу «Численные методы». Красноярск, 2007. 189с.
2. Рашиков В.И., Рошаль А.С. Численные методы решения физических задач. Учебное пособие. СПб.: Издательство «Лань», 2005. 208 с.
3. Шарый С.П. Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ, 2017.
4. Баженов А.Н., Карпова А.А. Интервальный анализ для исследователей. Ижевск. РХД. 2022.

7.2. Дополнительная литература

1. Малютин В.М., Складорова Е.А. Компьютерное моделирование физических явлений: Учебное пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2004. 156 с.
2. Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования: В 2 т./ Ин-т вычисл. математики. М.: Наука, 2005. Т.1 [отв. ред. Н.С.Бахвалов, В.В. Воеводин], 343с., Т.2 [отв. ред. В.П.Дымников], 405 с.
3. А.Н. Баженов, С.И. Жилин, С.И.Кумков, С.П.Шарый. Обработка и анализ данных с интервальной неопределённостью. Ижевск. РХД. 2022.
4. IEEE: Institute of Electrical and Electronic Engineers. 1788-2015 - IEEE Standard for Interval Arithmetic. IEEE Computer Society, New York, June 2015.

7.3. Интернет-ресурсы

Отечественные журналы: Математическое моделирование (Российская академия наук, Академиздатцентр «Наука»).

Отечественные журналы в переводе:

Отечественные журналы. «ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ» СО РАН

Иностраные журналы: Reliable Computing ISSN: 1573-1340

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные аудитории (3 аудитории), оборудованы:

- Столы;
- Стулья;
- Доски магнитно – маркерные;
- Экраны для презентаций;
- Мультимедийные проекторы;

- Персональный компьютер;
- Экран для презентаций

Программу разработал:

Старший научный сотрудник лаборатории
лаб. лазерной диагностики плазмы и
взаимодействия плазмы с поверхностью,
канд. физ.-мат. наук Баженов А.Н.