Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»

СБОРНИК
программ и заданий

Физтех-школа биологической и медицинской физики
(ФБМФ)

для студентов 3 курса
на весенний семестр
2020–2021 учебного года

МОСКВА
МФТИ
2021

Сборник программ и заданий для студентов 3 курса на весенний семестр 2020–2021 учебного года. Физтех-школа биологической и медицинской физики (ФБМФ). – Москва : МФТИ, 2021. – 40 с.

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
15 января 2021 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Динамические системы**
по направлению подготовки: 03.03.01 «Прикладные математика и физика», 19.03.01 «Биотехнология»
физтех-школа: **ФБМФ**
кафедра: **высшей математики**
курс: 3
семестр: 6

Трудоёмкость:
теор. курс: вариативная часть — 2 зачет. ед.;
лекции — 30 часов
практические (семинарские) занятия — 30 часов
лабораторные занятия — нет

Диф. зачёт — 6 семестр

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ — 60

Самостоятельная работа:
теор. курс — 30 часов

Программу и задание составил
к. ф.-м. н., доцент Д. А. Филимонов

Программа принята на заседании кафедры высшей математики 19 ноября 2020 г.

Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н., профессор Г. Е. Иванов

1. Биологические и химические модели, реализуемые динамическими системами: модели нейрона (Ходжина–Хаксли и ФитцХью–Нагумо), реакция Белоусова–Жаботинского (Брюсселятор, Орегонатор), уравнения Ван–дер Поля.
2. Общее определение динамической системы с дискретным и непрерывным временем. Фазовый поток. Траектории (орбиты), положения равновесия.
3. Качественный анализ и построение интегральных (фазовых) кривых на плоскости с помощью изоклин.
4. Автономные системы дифференциальных уравнений, свойства траекторий.
5. Теорема о выпрямлении векторного поля. Теорема Лиувилля о фазовом объёме.
6. Предельное поведение траекторий. Предельные множества, свойства. Классификация предельных множеств. Предельные циклы.
7. Теория индексов Пуанкаре. Вращение векторного поля вдоль кривой. Индекс особой точки.
8. Отображение последования, отображение Пуанкере. Связь дискретных и непрерывных динамических систем. Надстройка Смейла*.
9. Элементы теории возмущений. Топологическая эквивалентность, бифуркационная диаграмма, структурная устойчивость, грубость положений равновесия. Теорема Гробмана–Хартмана. Критерии Андронова структурной устойчивости поля на плоскости.
10. Бифуркация седлоузла, бифуркация Андронова–Хопфа.
11. Устойчивость по Ляпунову и асимптотическая устойчивость. Функция Ляпунова, теоремы Ляпунова и Четаева. Показатели Ляпунова*.
12. Динамические системы большой размерности. Первые интегралы. Методы редукции: регулярные и сингулярный. Теорема Тихонова.
13. Динамические системы с дискретным временем. Линейные системы (рекуррентные уравнения). Неподвижные точки, циклы, устойчивость, теорема Шарковского*. Бифуркации седлоузла, удвоения периода, Неймарка–Сакера*.
14. Показатели Ляпунова*. Фракталы*.

Литература

Основная

1. *Братусь А. С. Новожилов А. С. Платонов А. П.* Динамические системы и модели биологии. — Москва : Физматлит, 2010.
2. *Ахмеров Р. Р. Садовский Б. Н.* Очерки по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. `http://w.ict.nsc.ru/books/textbooks/akhmerov/ode_unicode/`

Дополнительная

3. *Каток А. Б. Хассельблат Б.* Введение в современную теорию динамических систем. — Москва : Факториал, 1999.
4. *Братусь А. С. Новожилов А. С.* Математические модели экологии и динамические системы с дискретным временем. — Москва : ВМК МГУ, 2003.
5. *Братусь А. С. Новожилов А. С.* Математические модели экологии и динамические системы с непрерывным временем. — Москва : МГУ, 2004.

ЗАДАНИЯ

Замечания

1. Задачи с подчёркнутыми номерами рекомендовано разобрать на семинарских занятиях.
2. Задачи, отмеченные *, являются необязательными для всех студентов.

ПЕРВОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 15–20 марта)

I. Фазовые портреты непрерывных динамических систем

1. Построить изоклины, соответствующие направлениям 0, ∞, 1, -1, и по ним нарисовать интегральные кривые:

<u>а)</u> $(x+3y)y' = y-3x$; <u>б)</u> $x^2+y^2y'=1$;
в) $(y^2+1)y' = y-x$; г) $(x^2+y^2)y' = 4x$.

2. Построить фазовый поток для следующих автономных уравнений и систем:

а) $x' = 3x^4$; <u>б)</u> $y' = ay(1-\frac{y}{b})$, $a>0$, $b>0$;

в) $\begin{cases} \dot{x} &= 3x, \\ \dot{y} &= -2y; \end{cases}$ г) $\begin{cases} \dot{x} &= -x-2y, \\ \dot{y} &= 2x-y. \end{cases}$

3. Найти все системы линейных автономных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами на плоскости, для которых сохраняется фазовый объём.

4. Выписать явно замену координат в окрестности точки $(0;1)$, выпрямляющую поле:

а) $\begin{cases} \dot{x} &= 2y, \\ \dot{y} &= -3x; \end{cases}$ <u>б)</u> $\begin{cases} \dot{x} &= 2x-y, \\ \dot{y} &= x+2y; \end{cases}$ в) $\begin{cases} \dot{x} &= -3x, \\ \dot{y} &= 2y. \end{cases}$

5. Найти предельные множества для каждой из траекторий следующих типов систем линейных автономных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами на плоскости:

а) седло; б) узел; в) центр; г) фокус; д) $\begin{cases} \dot{x} &= \lambda x, \\ \dot{y} &= 0. \end{cases}$

6. Доказать, что если у системы есть периодическое решение (кроме особой точки), то оно либо пересекает окружность $x^2+y^2=0.5$, либо окружает начало координат:

$$\begin{cases} \dot{x} &= -y + x(1-x^2-y^2), \\ \dot{y} &= x + y(1-x^2-y^2). \end{cases}$$

7. Построить фазовый портрет гладкого векторного поля с:
а) ровно 2 орбитами в ω-предельном множестве некоторой траектории;
б) ровно 3 орбитами в ω-предельном множестве некоторой траектории;
в) ровно 5 орбитами в ω-предельном множестве некоторой траектории;
г)* счётным числом орбит в ω-предельном множестве некоторой траектории.

8. Вычислить аналитически индексы для следующих типов особых точек для систем линейных автономных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами:
а) седло; б) фокус; в) центр; г) вырожденный узел.

9. Вычислить индекс особой точки векторного поля, нарисовать фазовый портрет:

$$\begin{cases} \dot{x} &= -x^2, \\ \dot{y} &= -y. \end{cases}$$

10. Построить фазовый портрет для гладкого векторного поля в окрестности одной особой точки с индексом
а) 2; б) -2; в)* $N \in \mathbb{Z}$.

II. Устойчивость

11. Исследовать нулевое решение на устойчивость с помощью теоремы Ляпунова об устойчивости по первому приближению:
а) $\begin{cases} \dot{x} &= x^2+y^2-2x, \\ \dot{y} &= 3x^2-x+3y; \end{cases}$ б) $\begin{cases} \dot{x} &= \ln\left(4y+\mathrm{e}^{-3x}\right), \\ \dot{y} &= 2y-1+\sqrt[3]{1-6x}. \end{cases}$

12. Построить функцию Ляпунова и исследовать устойчивость нулевого решения:
а) $\begin{cases} \dot{x} &= x^3-3y, \\ \dot{y} &= 3x+y^3; \end{cases}$ б) $\begin{cases} \dot{x} &= y-x+xy, \\ \dot{y} &= x-y-x^2-y^3. \end{cases}$

$\boxed{32+2^*}$

ВТОРОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 3–8 мая)

I. Периодические решения

13. Выписать отображение Пуанкаре для систем (за трансверсаль взять положительное направление оси Ox):

а) $\begin{cases} \dot{x} &= -x + 2y, \\ \dot{y} &= -2x - y; \end{cases}$ б) $\begin{cases} \dot{x} &= 3y, \\ \dot{y} &= -3x; \end{cases}$ в) $\begin{cases} \dot{x} &= y + x(2x^2 + 2y^2 - 1), \\ \dot{y} &= -x + y(2x^2 + 2y^2 - 1). \end{cases}$

14*. Построить векторное поле на плоскости, для которого отображение последования $f(x) = x + x(x-1)^2$.

15. Исследовать периодические орбиты и их устойчивость для системы

$$\begin{cases} \dot{x} &= y + x(2\sqrt{x^2 + y^2} - 1)(\sqrt{x^2 + y^2} - 1), \\ \dot{y} &= -x + y(2\sqrt{x^2 + y^2} - 1)(\sqrt{x^2 + y^2} - 1). \end{cases}$$

II. Теория возмущений

16. Построить бифуркационную диаграмму для пространства параметров и расширенную бифуркационную диаграмму для прямого произведения фазового пространства и пространства параметров:

а) $\dot{x} = a + x^2$; б) $\dot{x} = x^2 + ax + b$; в) $\begin{cases} \dot{x} &= a + x^2, \\ \dot{y} &= -y. \end{cases}$

<u>17</u>. Построить бифуркационную диаграмму для пространства параметров:

$$\begin{cases} \dot{x} &= ax + by, \\ \dot{y} &= cx + dy. \end{cases}$$

Указание. Перейти к трёхмерному пространству параметров: $\det A, \mathrm{tr} A, b^2 + c^2$.

18. Определить, при каких значениях параметров происходят бифуркации положений равновесия, и указать тип бифуркации:

а) $\dot{x} = rx(1-x) - px$; б) $\begin{cases} \dot{x} &= x, \\ \dot{y} &= a + y^2; \end{cases}$ в) $\begin{cases} \dot{x} &= a + x^2 y - bx - x, \\ \dot{y} &= bx - x^2 y. \end{cases}$

III. Дискретные динамические системы

19. Решить линейные рекуррентные уравнения и системы:

а) $y(n+2) - 2y(n+1) - 3y(n) = 0$;
б) $y(n+2) - 2y(n+1) + 2y(n) = 0$;
в) $y(n+3) - 3y(n+2) + 4y(n) = 0$;
г) $y(n+4) + 4y(n+2) + 4y(n) = 0$.

20. Решить линейные рекуррентные системы:

а) $\begin{cases} x(n+1) &= x(n) + 2y(n), \\ y(n+1) &= -3x(n) + 6y(n); \end{cases}$ б) $\begin{cases} x(n+1) &= 2x(n) - 3y(n), \\ y(n+1) &= 3x(n) + 2y(n). \end{cases}$

<u>21</u>. Для отображения $x(n+1) = rx(n)(1 - x(n))$, $r \geqslant 0$, $x \in [0; 1]$ найти:

i) неподвижные точки отображений, указать их устойчивость в зависимости от значения параметра;

ii)* циклы длины 2, если они существуют;

iii) значения параметра, при которых происходят бифуркации положений равновесия, и указать их тип.

22. Для отображения $x(n+1) = ax(n)\mathrm{e}^{-x(n)}$, $a \geqslant 0$, $x \geqslant 0$; найти:

i) неподвижные точки отображений, указать их устойчивость в зависимости от значения параметра;

ii)* циклы длины 2, если они существуют;

iii) значения параметра, при которых происходят бифуркации положений равновесия, и указать их тип.

23*. Пользуясь теоремой Тихонова, найти приближенное решение при $\varepsilon \to 0$ и указать область начальных условий, для которой применимо это приближение:

$$\begin{cases} \varepsilon\dot{x} &= (y - x^3) \\ \dot{y} &= -x^3 - y \end{cases}$$

$\boxed{21 + 4^*}$

Составитель задания к. ф.-м. н., доцент Д. А. Филимонов

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
15 января 2021 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Уравнения математической физики**
по направлению подготовки: 03.03.01 «Прикладные математика и физика»,
19.03.01 «Биотехнология»
физтех-школы: **ФБМФ, ФПМИ**
кафедра: **высшей математики**
курс: 3
семестр: 6

Трудоёмкость:
теор. курс: базовая часть — 5 зачет. ед.;
лекции — 45 часов
практические (семинарские) занятия — 45 часов
лабораторные занятия — нет

Экзамен — 6 семестр

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ — 90

Самостоятельная работа:
теор. курс — 105 часов

Программу и задание составил
к. ф.-м. н., доцент Т. В. Михайлова

Программа принята на заседании кафедры
высшей математики 19 ноября 2020 г.

Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н., профессор Г. Е. Иванов

1. Классификация дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка. Понятие характеристики.

2. Волновое уравнение в случае одной пространственной переменной. Постановка задачи Коши (в частности, локализованной задачи Коши), формула Даламбера. Область зависимости решения задачи Коши. Непрерывная зависимость решения от начальных функций. Пример отсутствия непрерывной зависимости в случае уравнения Лапласа (пример Адамара).
   Волновое уравнение в случае двух и трёх пространственных переменных. Плоские характеристики волнового уравнения, световой конус. Постановка задачи Коши; единственность решения. Существование решения задачи Коши для волнового уравнения в случае трёх пространственных переменных (формула Кирхгофа). Существование решения задачи Коши для волнового уравнения в случае двух пространственных переменных (формула Пуассона, метод спуска).
   Распространение волн в случае двух и трёх пространственных переменных. О диффузии волн. Непрерывная зависимость решения от начальных функций.

3. Задача Коши для уравнения теплопроводности. Фундаментальное решение уравнения теплопроводности. Классы единственности решений. Существование решения, формула Пуассона. Бесконечная дифференцируемость решения. Непрерывная зависимость решения от начальной функции. Отсутствие непрерывной зависимости решения для случая «обратной» теплопроводности. Принцип максимума для решения задачи Коши.

4. Смешанная задача для волнового уравнения и для уравнения теплопроводности в случае одной пространственной переменной. Единственность решения (метод интеграла энергии в случае волнового уравнения; принцип максимума в случае уравнения теплопроводности). Необходимые условия разрешимости задачи (в частности, условия согласования начальных и граничных функций).
   Метод Фурье решения смешанной задачи. Обоснование метода Фурье.

5. Гармонические функции. Фундаментальное решение уравнения Лапласа. Потенциалы. Формулы Грина. Бесконечная дифференцируемость гармонических функций. Теоремы о среднем. Принцип максимума. Теорема Лиувилля. Теорема об устранении особенности.

6. Задача Дирихле для уравнения Пуассона в ограниченной области. Необходимые условия разрешимости. Единственность решения; непрерывная зависимость решения от граничной функции.

Существование решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона в шаре.

7. Задача Неймана для уравнения Пуассона в ограниченной области. Необходимое условие разрешимости задачи Неймана.
   Теорема об общем виде решения. Существование решения задачи Неймана для уравнения Пуассона в шаре.
8. Область внешнего типа. Краевые задачи для уравнения Лапласа в областях внешнего типа.

Литература

Основная

1. *Михайлов В. П.* Лекции по уравнениям математической физики. — Москва : Физматлит, 2001.
2. *Михайлов В. П.* Дифференциальные уравнения в частных производных. — 2-е изд. — Москва : Наука, 1988.
3. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. — 4-е изд. — Москва : Наука, 1981. 512 с.
4. *Уроев В. М.* Уравнения математической физики. — Москва : ИФ Яуза, 1998.
5. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — Москва : Наука, 1997.
6. *Олейник О. А.* Лекции об уравнениях с частными производными. — 2-е изд. — Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005.
7. *Владимиров В. С., Михайлов В. П., Михайлова Т. В., Шабунин М. И.* Сборник задач по уравнениям математической физики. — 2-е. изд. — Москва : Наука, 1982.
8. *Владимиров В. С., Михайлов В. П., Михайлова Т. В., Шабунин М. И.* Сборник задач по уравнениям математической физики. — 5-е. изд. — Москва : Физматлит, 2016.
9. *Михайлов В. П., Михайлова Т. В., Шабунин М. И.* Сборник типовых задач по курсу уравнения математической физики. — Москва : МФТИ, 2007.
10. *Михайлова Т. В., Хасанов А. А.* Некоторые методы решения типовых задач по курсу уравнения математической физики. — Москва : МФТИ, 2020.

ЗАДАНИЯ

Все номера задач указаны по книге: *Владимиров В. С., Михайлов В. П., Михайлова Т. В., Шабунин М. И.* Сборник задач по уравнениям математической физики. — 5-е. изд. — Москва : Физматлит, 2016.

Замечания

1. Задачи с подчёркнутыми номерами рекомендовано разобрать на семинарских занятиях.
2. Задачи, отмеченные *, являются необязательными для всех студентов.

ПЕРВОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 15–20 марта)

I. Классификация уравнений 2-го порядка, характеристики

1. Определить тип уравнения и указать те множества плоскости (x, y), на которых он сохраняется:

а) $yu_{xx} + 2u_{xy} + xu_{yy} - u_y = 5x$;

б) $(x^2 + y^2 - 1)u_{xx} + xyu_{yy} - u_x = 0$.

2. Определить при различных вещественных значениях α и β тип уравнения

$$u_{xx} + 2\alpha u_{xz} + u_{yy} + 4\beta u_{yz} + 4u_{zz} = 0.$$

3. 2.1(2).

II. Приведение к каноническому виду уравнений 2-го порядка в случае двух независимых переменных в области

2.11 (6).

1. Решить задачу Коши:

а) $y^3u_{xy} - yu_{yy} - 3y^5u_x + (2 + 3y^3)u_y = 0$, $y > 0$, $x \in \mathbb{R}^1$;
$u|_{y=1} = 1 + 3x, \quad u_y|_{y=1} = 3(4 + 3x)$, $x \in \mathbb{R}^1$.

б) $x^2u_{xx} - 9y^2u_{yy} + 3xu_x - 3yu_y = 0$, $x > 1$, $y > 1$;
$u|_{x=y} = y^{2/3}$, $u_x|_{x=y} = y^{-3} + y^{-1/3}$, $y > 1$.

в) $x^2u_{xx} - xyu_{xy} - 2y^2u_{yy} + xu_x - 2yu_y = 9xy^2$, $x > 0$, $y > 0$;
$u|_{x=1} = 3e^y$, $u_x|_{x=1} = -y^2$.

г) $yu_{xx} + (x - y)u_{xy} - xu_{yy} - u_x + u_y = 0$;
$u|_{y=0} = 2x^2$, $u_y|_{y=0} = 2x, \quad 1 < x < 4$.

д) $y^4u_{yy} + y^2u_{xy} - 2u_{xx} + 2y^3u_y = 0$;
$u|_{y=1} = x^2 + 5$, $u_y|_{y=1} = 2x - 6$, $1 < x < 2$.

2. Решить задачу Гурса:

$$x^2u_{xx} - 4y^2u_{yy} + xu_x - 4yu_y = 0, \quad \frac{1}{x^2} < y < x^2, \quad x > 0;$$

$$u|_{y=\frac{1}{x^2}} = 1 + 2x^4, \quad u|_{y=x^2} = 2 + x^4.$$

3. Найти максимальную область плоскости (x, y), в которой решение задачи Коши: $u_{yy} - u_{xx} = 0$;
$u|_{y=0} = u_0(x), u_y|_{y=0} = u_1(x), 0 < x < 1$ при $u_0(x) \in C^2(0;1)$, $u_1(x) \in C_1(0;1)$, существует и единственно.

III. Волновое уравнение

1. Решить задачу Коши:

$$\begin{cases} 4u_{tt} = u_{xx} + 4t^2\cos 2x, & (t, x) \in \mathbb{R}^2, \\ u|_{t=0} = e^x, \ u_t|_{t=0} = x^2 & x \in \mathbb{R}^1. \end{cases}$$

2. Решить задачи Коши для уравнения

$$u_{tt} = a^2 u_{xx}, \qquad x \in \mathbb{R}^1, \quad t > 0$$

со следующими начальными условиями:

<u>а</u>) $u|_{t=0} = \varphi(x)$, $u_t|_{t=0} = 0$;

б) $u|_{t=0} = 0$, $u_t|_{t=0} = \psi(x)$,

где $\varphi(x) = \left(1 - \frac{|x|}{l}\right)\theta(l - |x|)$, $\psi(x) = \theta(l - |x|)$,

$l = \text{const} > 0$, $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$

Построить в каждом из случаев графики решений в моменты времени

$$t = \frac{l}{2a}, \qquad t = \frac{l}{a}, \qquad t = \frac{2l}{a}.$$

3. Решить смешанную задачу на полуоси:

а) 21.2, 21.19;

<u>б</u>) $u_{tt} = u_{xx} + xe^t, \quad x > 0, \quad t > 0;$
$u|_{t=0} = 1 + x, \quad u_t|_{t=0} = 4 - 5x, \quad x \geq 0;$
$(2u + u_x)|_{x=0} = (1 + t)e^t + 2 + t - 3t^2$, $t \geq 0$;

в) $4u_{tt} = u_{xx} - 3\sin(x + t)$, $x > 0$, $t > 0$;
$u|_{t=0} = \sin x + \sin 2x$, $u_t|_{t=0} = 2 + \cos x, \quad x \geq 0;$
$(u_x - 2u)|_{x=0} = 2 - 4t - 2\sin t + \cos t, \quad t \geq 0;$

<u>г</u>) $u_{tt} + u_{xt} - 2u_{xx} = 0, \quad x > 0, \quad t > 0;$
$u|_{t=0} = \operatorname{sh} x + \operatorname{arctg} x, \quad u_t|_{t=0} = \operatorname{ch} x - \frac{2}{1+x^2}, \quad x \geq 0;$
$u_x|_{x=0} = \operatorname{ch} t + 1, \quad t \geq 0.$

4. Решить задачу Коши:

а) 12.43(5), 12.44(7);

<u>б</u>) $u_{tt} = \Delta u + (x^2 + y^2)\sin t$, $t > 0$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;
$u|_{t=0} = 0$, $u_t|_{t=0} = (x^2 + y^2 + z^2)^{5/2} - y^2$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;

в) $u_{tt} = 8\Delta u + x$, $t > 0$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;
$u|_{t=0} = e^{y-z}$, $u_t|_{t=0} = x^2 + y^2 + z^2$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;

<u>г</u>) $u_{tt} = \Delta u - 81(t + 1)^2 \operatorname{sh}(2x - 2y + z)$, $t > 0$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;
$u|_{t=0} = (2x + y - z)\cos y$, $u_t|_{t=0} = x^2 - y^2 + z^2$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;

д) $u_{tt} = \frac{1}{5}\Delta u + 2t^2 \cos(x + 2y)$, $t > 0$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$;
$\Delta u = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}$,
$u|_{t=0} = yz^3$, $u_t|_{t=0} = \frac{1}{1+(x-2z)^2}$, $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$.

5. Найти решение задачи Коши:
$u_{tt} = a^2\Delta u$, $t > 0$, $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$;
$u|_{t=0} = u_0(x) = \alpha(r)$, $u_t|_{t=0} = u_1(x) = \beta(r)$, $x \in \mathbb{R}^3$;
$u_0(x) \in C^3(\mathbb{R}^3)$, $u_1(x) \in C^2(\mathbb{R}^3)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

<u>Указание.</u> Искать решение в виде $u(x, t) = \frac{v(r,t)}{r}$.

6. Найдите $u(t,0,0,0)$, $t>0$, где $u(t,x,y,z)$ — решение задачи Коши,

$$4u_{tt} = \Delta u, \quad t>0, \quad (x,y,z)\in\mathbb{R}^3,$$

$$u|_{t=0}=0, \quad u_t|_{t=0} = \begin{cases} \ln(1+x^2+y^2+z^2), & (x,y,z)\in G, \\ 0. & (x,y,z)\in\mathbb{R}^3\setminus G, \end{cases}$$

G={x=(x,y,z): y>0, 0<x<z}.

ВТОРОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 10–15 мая)

I. Задача Коши для уравнения теплопроводности

1. Решить задачи Коши:

а) $u_t = \Delta u + e^{-9t}\cos(2x-y+2z), \quad t>0, \quad (x,y,z)\in\mathbb{R}^3;$
$u|_{t=0} = xy^2z^3 + \cos y\cdot\sin(x+y+z),\ (x,y,z)\in\mathbb{R}^3.$

б) $u_t = \frac{1}{4}\Delta u + t^4(x+1), \quad t>0, \quad (x,y,z)\in\mathbb{R}^3;$
$u|_{t=0} = e^{2z-z^2}\cdot\sin(x+y), \quad (x,y,z)\in\mathbb{R}^3.$

в) $u_t = \Delta u + x^2y^2\sin t, \quad t>0, \quad (x,y,z)\in\mathbb{R}^3;$
$u|_{t=0} = xyz\cos x.$

г) 13.5(5,7), 13.6(3).

2*. Пусть $u(x,t)$, $x\in\mathbb{R}^1$, $t\geq 0$ — ограниченное решение задачи Коши,

$$u_t - u_{xx} = 0, \quad x\in\mathbb{R}^1, \quad t>0.$$
$$u|_{t=0} = u_0(x), \quad x\in\mathbb{R}^1,$$

где $u_0(x)\in C(\mathbb{R}^1)$, $\lim\limits_{x\to-\infty} u_0(x) = A$, $\lim\limits_{x\to+\infty} u_0(x) = B$. Найти $\lim\limits_{t\to+\infty} u(x,t)$ при каждом $x\in\mathbb{R}^1$.

II. Смешанная задача с начальными условиями на отрезке. Метод Фурье

1. 20.50(1); 20.14(2); 20.3(3).

2. Решить смешанные задачи:

а) $u_{tt} = u_{xx} - 2\cos 3t,\ t>0,\ 0<x<\pi;$
$u_x|_{x=0} = 0,\ u_x|_{x=\pi} = 2\pi\cos 3t,\ t\geq 0;$
$u|_{t=0} = x^2,\ u_t|_{t=0} = 0,\ 0\leq x\leq\pi;$

б) $u_t = u_{xx} + e^{-9t}(2\pi x + 1 - 9t),\ 0<x<\frac{\pi}{2},\ t>0;$
$u|_{x=0} = te^{-9t},\ u_x|_{x=\frac{\pi}{2}} = \pi,\ t>0;$
$u|_{t=0} = \pi x - \sin x,\ 0<x<\frac{\pi}{2};$

в) $u_{tt} - 4u_{xx} = 2x + 4\cos 2t\cdot\sin x,\ t>0,\ 0<x<\pi;$
$u|_{x=0} = \pi,\ u|_{x=\pi} = \pi t^2,\ t\geq 0;$
$u|_{t=0} = (\pi - x)(\frac{\pi}{2}x + 1),\ u_t|_{t=0} = 4\sin 2x,\ 0\leq x\leq\pi;$

г) $u_{tt} = u_{xx} - u + t^2 + 2,\ t>0,\ 0<x<1;$
$u|_{t=0} = \sin 3\pi x,\ u_t|_{t=0} = x,\ t\geq 0;$
$u|_{x=0} = t^2,\ u|_{x=1} = t + t^2,\ 0\leq x\leq 1.$

III. Метод Фурье решения задач в прямоугольной области

20.18; 20.19; 20.48.

IV. Краевые задачи для уравнения Пуассона в круге и кольце, шаре и шаровом слое

Решить краевые задачи в $\mathbb{R}^2$ ($x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$): 16.1 (3). (Решить и внешнюю задачу Дирихле с тем же граничным условием.)

1. $\Delta u = 1,\ \ r < 2; \quad u_r|_{r=2} = 2\sin\left(\varphi + \frac{\pi}{3}\right) + 1.$

2. $\Delta u = \frac{18}{r^3}\sin 2\varphi, \quad \frac{1}{2} < r < 1;$
$u_r|_{r=1/2} = 28\sin^2\varphi, \quad u_r|_{r=1} = 4\cos^2\varphi + 5.$

3. $\Delta u = 24x, \quad r < 1; \quad (2u + u_r)|_{r=1} = 20\sin^3\varphi.$

4. $\Delta u = -\frac{9}{r^2}\cos 3\varphi, \quad r > 1; \quad (u - u_r)|_{r=1} = \cos^3\varphi.$

5. $\Delta u = 4\frac{(x-y)^2}{(x^2+y^2)^3}, \quad 1 < r < 2;$
$u_r|_{r=1} = \frac{2xy}{x^2+y^2}, \quad (u_r + u)|_{r=2} = \frac{(x+y)^2}{8(x^2+y^2)}.$

6. Исследовать, при каком α задача Неймана

$$\Delta u = y, \quad r < 2, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2},$$

$$u_r|_{r=2} = \sin^3\varphi + \alpha\cos^2\varphi$$

имеет решение, и найти это решение.

7. Решить краевую задачу в $\mathbb{R}^3$ ($x = r\cos\varphi\sin\theta$, $y = r\sin\varphi\sin\theta$, $z = r\cos\theta$):

а) $\Delta u = \frac{1}{r^4}$, $r > 2$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$,
$(u - u_r)|_{r=2} = \sin\theta \cdot \cos^2\frac{\theta}{2} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{6} - \varphi\right);$

б) $\Delta u = 6z, \quad r < 1, \quad u|_{r=1} = 2\sin^2\varphi\sin^2\theta + \cos^3\theta.$

16.26(3); 16.27(3); 16.28(2); 16.31(1).

Составитель задания — к. ф.-м. н., доцент Т. В. Михайлова

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
15 января 2021 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Вычислительная математика**
по направлению подготовки: 03.03.01 «Прикладные математика и физика»
физтех-школа: **ФБМФ**
кафедра: **вычислительной физики**
курс: 3
семестр: 6

Трудоёмкость: базовая часть – 3 зачет. ед.;

лекции – 30 часов
практические (семинарские)
занятия – нет
лабораторные занятия – 30 часов

Экзамен – нет

Диф. зачёт – 6 семестр

ВСЕГО ЧАСОВ – 60 Самостоятельная работа – 75 часов

Программу и задание составил
д.ф.-м.н., профессор. А. И. Лобанов

Программа принята на заседании кафедры
вычислительной физики
24 ноября 2020 г.

Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н., профессор, чл.-корр. РАН И. Б. Петров

1. Понятие жесткой задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ЖС ОДУ). Жесткие системы в химии и биологии – примеры. Методы численного решения жестких систем ОДУ: одношаговые (неявные методы Рунге–Кутты, методы Розенброка) и многошаговые (формулы дифференцирования назад). A-устойчивость, L-устойчивость и монотонность схем для решения ЖС ОДУ. Функция устойчивости и область устойчивости методов Рунге–Кутты.

   *Линейные многошаговые методы. Методы Гира в представлении Нордсика.
2. Численное решение краевых задач для ОДУ. Методы решения линейных краевых задач (метод численного построения общего решения, конечно-разностный метод для линейного уравнения второго порядка, метод прогонки). Методы решения нелинейных краевых задач (метод стрельбы, метод квазилинеаризации).

   *Вариационно-разностные и проекционные методы построения приближенного решения. *Метод конечных элементов. *Задача на собственные значения (Штурма–Лиувилля). *Понятие жесткой краевой задачи. *Методы решения жесткой линейной краевой задачи.
3. Разностные методы решения задач, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных. Методы построения аппроксимирующих разностных уравнений для уравнений в частных производных. Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Основная теорема вычислительной математики. Приемы исследования разностных схем на устойчивость. Принцип максимума, спектральный признак устойчивости. Принцип замороженных коэффициентов.

   *Энергетический признак устойчивости
4. Численные методы решения линейных уравнений в частных производных параболического типа.

   Математические модели в биологии, сводящиеся к системам полулинейных уравнений типа «реакция-диффузия». Неявные разностные схемы. Понятие о методах расщепления по физическим процессам.

   Квазилинейное уравнение теплопроводности, его свойства.

   Консервативные разностные схемы. Приемы построения консервативных разностных схем.

   Разностные схемы для решения многомерных уравнений теплопроводности. Понятие о методах расщепления. Метод переменных направлений.
5. Численные методы решения уравнений в частных производных гиперболического типа на примере уравнения переноса и волнового

уравнения. Монотонные разностные схемы. Теорема С. К. Годунова о связи порядка аппроксимации и монотонности для линейных разностных схем.

6. Системы диференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа. Характеристики, инварианты Римана. Корректная постановка краевых условий для системы уравнений с частными производными гиперболического типа. Характеристическая и девергентная формы записи. Разностные схемы для характеристической формы записи системы.
7. Численные методы решения уравнений в частных производных эллиптического типа. Разностная схема “крест” для численного решения уравнений Лапласа, Пуассона. Итерационные методы для численного решения возникающих систем линейных уравнений. Принцип установления для решения стационарных задач.

Литература

Основная

1. *Рябенький В.С.* Введение в вычислительную математику. – Москва : Наука–Физматлит, 1994. – 335 с.; 3-е изд. Москва : Физматлит, 2008. – 288 с. (Физтеховский учебник).
2. *Федоренко Р.П.* Введение в вычислительную физику / под ред. А.И. Лобанова. – 2 изд. – Москва : Изд-во МФТИ, 1994. –528 с.; Долгопрудный: Интеллект, 2008. – 504 с. (Физтеховский учебник).
3. *Косарев В.И.* 12 лекций по вычислительной математике. – 3-е изд. – Москва : Физматкнига, 2013. – 240 с.
4. *Лобанов А.И., Петров И.Б.* Лекции по вычислительной математике. – Москва : Интернет–Университет информационных технологий, 2006. – 522 с.
5. *Аристова Е.Н., Лобанов А.И.* Практические занятия по вычислительной математике в МФТИ. Часть II. – Москва : МФТИ, 2015. – 310 с.

Дополнительная

1. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2011. – 592 с.
2. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – Москва : Мир, 1999. – 685 с.
3. *Самарский А А., Гулин А В*. Численные методы математической физики. – Москва : Научный мир, 2003. – 316 с.
4. *Калиткин Н. Н., Корякин П. В.* Численные методы. Книга 2. Методы математической физики. – Москва : Academia, 2013. – 304 с.

Задание 1 (срок сдачи – вторая неделя марта)
Индивидуальные задания – численное исследование ЖС ОДУ. Краевая задача для систем ОДУ.
Или задачи из пособия [5] (по согласованию с преподавателем).

Лабораторная работа «Решение линейного уравнения теплопроводности с использованием Matlab»

Контрольная работа — первая декада мая

Задание 2 (срок сдачи 20–31 апреля)
Индивидуальные задания – исследование разностных схем или методов конечных элементов для решения уравнений в частных производных гиперболического и эллиптического типов.
Или задачи из пособия [5] (по согласованию с преподавателем).

* Курсовая работа – самостоятельная реализация разностной схемы для нелинейного уравнения в частных производных или системы нелинейных уравнений в частных производных (по согласованию с преподавателем)

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
15 января 2021 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Квантовая механика**
по направлению подготовки:
03.03.01 «Прикладные математика и физика»
физтех-школа: **ФБМФ**

кафедра: **теоретической физики**
курс: 3
семестр: 6

Трудоемкость:
теор. курс: базовая часть – 3 зачет. ед.
лекции – 30 часов
Экзамен – 6 семестр
практические (семинарские)
занятия – 30 часов
Курсовые и контрольные работы – 4

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ — 60 Самостоятельная работа – 45 часов

Программу и задание составил к.ф.-м.н., доц.
Л. П. Суханов

Программа принята на заседании
кафедры теоретической физики
25 декабря 2020 года

Заведующий кафедрой
д.ф.-м.н., профессор
Ю.М. Белоусов

МНОГОЭЛЕКТРОННАЯ ПРОБЛЕМА
И МЕТОДЫ ЕЁ РЕШЕНИЯ
Часть II

1. Стационарная теория возмущений

Стационарная теория возмущений в случае невырожденных уровней энергии. Первое приближение теории стационарных возмущений. Энергетическая поправка второго приближения теории стационарных возмущений. Критерий применимости стационарной теории возмущений. Стационарное возмущение вырожденных уровней дискретного спектра. Секулярное уравнение. Правильные волновые функции нулевого приближения. Квазивырождение, случай двух близких уровней энергии. Эффект Штарка. Линейный эффект Штарка в атоме водорода.

2. Нестационарная теория возмущений

Нестационарное возмущение дискретного спектра. Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени. Вероятность перехода. Адиабатические и внезапные возмущения. Переходы под влиянием постоянного во времени возмущения. "Золотое правило" Ферми. Переходы под действием периодического возмущения в дискретном и непрерывном спектрах. Переходы в двухуровневой системе. Физические основы магниторезонансных методов исследования вещества.

3. Сложение моментов

Сложные квантовые системы. Сложение моментов. Коэффициенты Клебша–Гордана. Полный угловой момент.

4. Системы тождественных частиц

Симметрии волновой функции системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Представление многоэлектронной волновой функции в виде детерминанта Слэтера. Принцип Паули. Связь симметрии координатной части волновой функции системы с полным спином.

5. Атом гелия

Атом гелия. Спиновые функции двух электронов. Пара- и ортосостояния. Обменное взаимодействие.

6. Сложный атом

Вариационный принцип, вычисление энергии основного состояния. Метод Хартри–Фока. Приближение центрального самосогласованного поля (ССП). Электронные конфигурации. Интегралы движения в сложных атомах. Термы. Правила Хунда. LS-связь. Тонкая структура уровней. Правило интервалов Ланде.

7. Атом в магнитном поле

Гамильтониан сложного атома во внешнем магнитном поле. Гамильтониан Паули. Иерархия взаимодействий в атоме. Эффекты Зеемана и Пашена–Бака. Диамагнетизм атомов. Парамагнетизм Ван-Флека.

8. Основы теории излучения

Гамильтониан свободного электромагнитного поля, взаимодействие систем заряженных частиц со свободным электромагнитным полем. Электрическое дипольное излучение. Правила отбора для электрического дипольного излучения.

9. Молекулярное уравнение Шрёдингера

Уравнение Шрёдингера для молекулярной системы. Адиабатическая теория. Приближение Борна–Оппенгеймера. Понятие поверхности потенциальной энергии. Границы применимости адиабатической теории.

10. Основное уравнение квантовой механики молекул

Иерархия современных компьютерных методов решения многоэлектронной проблемы.

11. Метод Хартри–Фока

Вычисление матричных элементов между двумя детерминантами Слэтера. Вариационный метод приближённого решения многоэлектронной задачи. Уравнения Хартри–Фока в канонической форме. Занятые и виртуальные орбитали. Теорема Купманса.

Литература

Основная

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — Москва : Физматлит, 2001.

2. *Мессиа А.* Квантовая механика. — Москва : Наука, Т. 2, 1979.

3. *Белоусов Ю.М.* Курс квантовой механики. — Москва : МФТИ, 2006.

4. *Киселёв В.В.* Квантовая механика. Курс лекций. — Москва : МЦНМО, 2009.

5. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. — Москва : Наука, 1981.

6. *Белоусов Ю.М., Бурмистров С.Н., Тернов А.И.* Задачи по теоретической физике : учеб. пособие. — Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2013.

Дополнительная

1. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. — Москва : Наука, 1973.

2. *Елютин П.В., Кривченков В.Д.* Квантовая механика. — Москва : Наука, 1976.

3. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. — Москва : Наука, 1976.

4. *Аллилуев С.П.* Квантовая теория сложного атома и квантовая теория излучения : учеб. пособие. — Москва : МФТИ, 1984.

5. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Т. 2. — Москва : ЛКИ, 2008.

6. *Фудзинага С.* Метод молекулярных орбиталей. — Москва : Мир, 1983.

7. *Цюлике Л.* Квантовая химия. — Т. 1. — Москва : Мир, 1976.

8. *Дьюар М.* Теория молекулярных орбиталей в органической химии. — Москва : Мир, 1972.

9. *Мак-Вини Р., Сатклиф Б.* Квантовая механика молекул. — Москва : Мир, 1972.

10. *Уилсон С.* Электронные корреляции в молекулах. — Москва : Мир, 1987.

11. *Степанов Н.Ф.* Квантовая механика и квантовая химия. — Москва : Мир, 2001.

12. *Суханов Л.П.* Молекулярное уравнение Шрёдингера : учебно-методическое пособие. — Москва : МФТИ, 2008. – 14 с.

13. *Набиев Ш.Ш., Суханов Л.П.* Эффекты структурной нежёсткости в молекулярных системах (авторский обзор)// Изв. АН. Сер. Хим. 1999. № 8. С. 1415–1441.

ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ КУРСА

ВЕКТОРЫ СОСТОЯНИЯ И ОПЕРАТОРЫ

Эрмитово сопряженные операторы:

$$\hat{F}|\psi\rangle \equiv |\hat{F}\psi\rangle, \quad \langle\varphi|\hat{F}\psi\rangle = \langle\hat{F}^{+}\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}^{+}\varphi\rangle^{*}.$$

Физические величины (наблюдаемые):

$$F \to \hat{F}, \quad \hat{F}^{+} = \hat{F}, \quad \langle F\rangle = \langle\psi|\hat{F}\psi\rangle \equiv \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle.$$

Дискретный спектр:

$$\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle, \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}.$$

Непрерывный спектр:

$$\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle, \quad \langle f|f'\rangle = \delta(f - f').$$

Разложение вектора состояния по полному базису:

$$|\psi\rangle = \sum_{n} |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int df|f\rangle\langle f|\psi\rangle.$$

Условие полноты:

$$\sum_{n} |n\rangle\langle n| + \int df|f\rangle\langle f| = \hat{1}.$$

Нормировка на единицу и вероятности:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1, \quad w_n = |\langle n|\psi\rangle|^2, \quad w(f)df = |\langle f|\psi\rangle|^2 df.$$

Коммутатор:

$$\left[\hat{F}, \hat{G}\right] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}.$$

Соотношение неопределенностей ($\hat{F}^{+} = \hat{F}$, $\hat{G}^{+} = \hat{G}$):

$$\left[\hat{F}, \hat{G}\right] = i\hat{K}, \quad \langle\left(\hat{F} - \langle\hat{F}\rangle\right)^2\rangle\langle\left(\hat{G} - \langle\hat{G}\rangle\right)^2\rangle \geq \frac{\langle\hat{K}\rangle^2}{4}.$$

Волновая функция в f-представлении: $\langle n|\psi\rangle, \langle f|\psi\rangle$.

КООРДИНАТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Операторы координаты и импульса:

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}.$$

Собственные функции оператора импульса:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}, \quad \langle\vec{p}\,'|\vec{p}\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,').$$

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Зависимость вектора состояния от времени:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi(t)\rangle.$$

Стационарное состояние:

$$\Psi_E(\vec{r}, t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\psi_E(\vec{r}), \quad \hat{H}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}).$$

Зависимость средних значений от времени ($\hat{F}$ не зависит явно от t):

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \langle\Psi|\frac{d\hat{F}}{dt}|\Psi\rangle, \quad \frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}\right].$$

ЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Гамильтониан и энергетический спектр:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right),$$

осцилляторная единица энергии: $E_0 = \hbar\omega$,

осцилляторная единица длины: $a_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$,

осцилляторная единица импульса: $p_0 = \dfrac{\hbar}{a_0} = \sqrt{\hbar m\omega}$.

$$\hat{a} = \frac{\hat{\xi} + i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}, \quad \hat{\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x}, \quad \hat{p}_\xi = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}},$$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Волновые функции стационарных состояний:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\xi)\, e^{-\xi^2/2}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}, \quad \xi = \alpha x.$$

Полиномы Эрмита:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\, e^{-\xi^2} = e^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}.$$

Операторы понижения и повышения:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \quad |n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle.$$

УГЛОВОЙ МОМЕНТ

Активное преобразование поворота вектора состояния (система координат 2 получена из системы координат 1 поворотом на угол φ вокруг единичного вектора $\vec{n}$):

$$|\psi;2\rangle = \hat{R}(\vec{\varphi}\,)|\psi;1\rangle, \quad \hat{R}(\vec{\varphi}\,) = e^{-i\hat{\vec{J}}\vec{\varphi}/\hbar}, \quad \vec{\varphi} = \varphi\,\vec{n},$$

где $\hat{\vec{J}}$ – оператор углового момента.
Фундаментальное определение оператора углового момента:

$$\left[\hat{j}_i, \hat{j}_k\right] = ie_{ikl}\hat{j}_l.$$

Операторы повышения и понижения:

$$(\hat{j}_x \pm i\hat{j}_y)|jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\,|j,\, m{\pm}1\rangle.$$

СПИН ЭЛЕКТРОНА

$$\hat{s}_i = \frac{\sigma_i}{2}\,, \quad \sigma_k\sigma_l = \delta_{kl} + ie_{klm}\sigma_m.$$

Матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Спиновые состояния:

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \alpha \equiv |+\rangle, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \beta \equiv |-\rangle.$$

ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ

Оператор орбитального момента:

$$\hat{\vec{L}} = \hbar\,\hat{\vec{l}} = \left[\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}\right] = -i\hbar\left[\vec{r} \times \vec{\nabla}\right], \quad \left[\hat{l}_i, \hat{l}_j\right] = i\, e_{ijk}\, \hat{l}_k\,,$$

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right], \quad \hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Собственные функции операторов орбитального момента:

$$\begin{cases} \hat{\vec{l}}^{\,2} Y_{lm}(\theta,\varphi) &= & l(l+1)\,Y_{lm}(\theta,\varphi), & l = 0, 1, 2, \ldots, \\ \hat{l}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) &= & m\,Y_{lm}(\theta,\varphi), & m = 0, \pm 1 \ldots \pm l. \end{cases}$$

Сферические гармоники:

$$\begin{cases} Y_{lm}(\theta,\varphi) = C_{lm}\, P_l^m(\theta)\, e^{im\varphi}, & m \geq 0, \\ Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m\, Y^*_{l,-m}(\theta,\varphi), & m < 0, \end{cases}$$

нормировочная постоянная:

$$C_{lm} = (-1)^m \left(\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right)^{1/2},$$

присоединенные полиномы Лежандра:

$$P_l^m(\theta) = (\sin\theta)^m \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m}\, P_l(\cos\theta), \quad P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\,\frac{d^l}{d\xi^l}\,(\xi^2-1)^l.$$

АТОМ ВОДОРОДА

Гамильтониан и энергетический спектр:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}, \quad \hat{H}|nlm\rangle = E_n|nlm\rangle, \quad E_n = -\frac{Z^2e^2}{2an^2}\,.$$

атомная единица (а.е.) длины: $a = \hbar^2/\mu e^2$,
а.е. импульса: $\hbar/a = \mu e^2/\hbar$,
а.е. скорости: $e^2/\hbar$,
а.е. энергии: $e^2/a = \mu e^4/\hbar^2$.

Волновые функции стационарных состояний:

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl}\rho^l v_{n_r l}(\rho)\, e^{-Z\rho/n}, \quad v_{n_r l}(\rho) = L_{n_r}^{2l+1}(2Z\rho/n),$$

где $\rho = r/a$, $L_{n_r}^{2l+1}(2Z\rho/n)$ – обобщенный полином Лагерра степени $n_r = n - l - 1$, где n_r – радиальное квантовое число.

Сферические гармоники для низших моментов:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1\,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), \quad Y_{2\,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2\,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi}.$$

Радиальные функции для низших состояний:

$$R_{10} = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}}\, e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad R_{20} = \sqrt{\frac{Z^3}{2a^3}}\left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}}, \quad R_{21} = \sqrt{\frac{Z^5}{24a^5}}\, r\, e^{-\frac{Zr}{2a}}.$$

СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Случай невырожденного энергетического спектра:

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle, \quad E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n}\frac{|\langle n|V|k\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k\neq n}\frac{\langle\psi_k^{(0)}|V|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}|\psi_k^{(0)}\rangle.$$

Случай вырожденного энергетического спектра, секулярное уравнение:

$$\det\|V_{\alpha\beta} - E^{(1)}\delta_{\alpha\beta}\| = 0.$$

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Первый порядок:

$$W_{if}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_{t_0}^{t}\langle f|V|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'}dt'\right|^2,$$

$$W_{if}(-\infty, +\infty) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| V_{fi}(\omega_{fi}) \right|^2 .$$

Вероятность перехода в единицу времени в непрерывном спектре («золотое правило» Ферми):

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ \left| V_{fi} \right|^2 \rho(E_f) \right\}_{E_f = E_i} ,$$

где $\rho(E_f) = d\nu_f/dE$ — плотность энергетического спектра.

УРАВНЕНИЕ ПАУЛИ

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi - \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\mathcal{H}} \hat{\vec{\sigma}}) \Psi + e\phi\Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} .$$

СИСТЕМЫ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ

Ферми-частицы: $\Psi(x_1, x_2, t) = -\Psi(x_2, x_1, t)$,
бозе-частицы: $\Psi(x_1, x_2, t) = +\Psi(x_2, x_1, t)$, где $x \equiv (\vec{r}, m_s)$.

Одночастичное приближение (приближение слабо взаимодействующих частиц).
Ферми-частицы:

$$\Psi_{n_1, n_2, \ldots n_N} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \ldots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \ldots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \ldots & \psi_{n_N}(x_N) \end{pmatrix} .$$

СЛОЖНЫЙ АТОМ

Гамильтониан взаимодействия с внешним магнитным полем:

$$\widehat{V} = \widehat{V}_Z + \widehat{V}_D,$$

$$\widehat{V}_Z = \mu_B \vec{\mathcal{H}} (\widehat{\vec{L}} + 2\widehat{\vec{S}}) \text{ — зеемановское взаимодействие},$$

$$\widehat{V}_D = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \vec{A}^{\,2}(\vec{r}_a) \text{ — диамагнитное взаимодействие}.$$

Слабое поле.

Состояние: $|\text{конфигурация}; L, S, J, M_J\rangle$,
полное расщепление $(2J+1)$-кратно вырожденного уровня энергии:

$$\varepsilon^{(1)}_{\mathcal{H}} = g_J \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathcal{H} M_J,$$

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \text{ -- фактор Ланде.}$$

Сильное поле.

Состояние: $|\text{конфигурация}; L, M_L, S, M_S\rangle$,
расщепление $(2L+1)(2S+1)$-кратно вырожденного уровня энергии:

$$\varepsilon^{(1)}_{\mathcal{H}} = \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathcal{H}(M_L + 2M_S).$$

ИЗЛУЧЕНИЕ

Дипольное приближение ($\exp(ikr) \simeq 1$):

$$w_{\text{спонт. изл.}} = \frac{4\omega^3_{if}}{3\hbar c^3} |\vec{d}_{if}|^2, \quad \omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar.$$

Правила отбора для дипольного (E1) излучения:

Слабое поле			Сильное поле		
ΔJ	$=$	$0, \pm 1$	ΔL	$=$	$0, \pm 1$
ΔM_J	$=$	$0, \pm 1$	ΔM	$=$	$0,\pm 1$
ΔL	$=$	$0,\pm 1$	ΔS	$=$	0
ΔS	$=$	0	ΔM_S	$=$	0

$$\Pi_i = -\Pi_f$$

1-е ЗАДАНИЕ

УПРАЖНЕНИЯ

1. Вычислите матричные элементы: $\langle 2p|\hat{x}|1s\rangle$, $\langle 2p|\hat{y}|1s\rangle$, $\langle 2p|\hat{z}|1s\rangle$ для атома водорода. Какие правила отбора они определяют?

2. То же упражнение, но для матричных элементов $\langle 2p|\hat{p}_x|1s\rangle$, $\langle 2p|\hat{p}_y|1s\rangle$, $\langle 2p|\hat{p}_z|1s\rangle$.

3. Вычислите средние значения операторов $(\hat{\vec{l}}\hat{\vec{s}})$, $(\hat{\vec{l}}\hat{\vec{j}})$ и $(\hat{\vec{j}}\hat{\vec{s}})$ в состоянии $|l, s, j, m_j\rangle$.

4. Используя понижающий оператор $\hat{S}_-$, найти собственные функции операторов $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ системы двух электронов ($\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2$, $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$).

5. Используя понижающий оператор $\hat{S}_-$, постройте собственные функции операторов $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ двух бозонов со спинами $s_1 = s_2 = 1$ ($\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2$, $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$).

6. Получите нормировочный множитель N–электронной волновой функции, представленной в виде детерминанта Слэтера.

ЗАДАЧИ

1. ^{C} Вычислите электрическую поляризуемость атома водорода в основном состоянии.

2. ^{C} Используя стационарную теорию возмущений, найдите поправки к уровням энергии линейного гармонического осциллятора под действием следующих возмущений:

$$\text{(а)}\ \hat{V} = \alpha x, \quad \text{(б)}\ \hat{V} = Ax^3 + Bx^4.$$

3. Найдите смещение уровня энергии основного состояния атома водорода, обусловленное конечным размером ядра. Примите, что ядро представляет собой равномерно заряженный по объему шар радиуса r_0.

4. ^{C} Исследуйте расщепление в однородном электрическом поле уровня энергии атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ (эффект Штарка). Как зависит энергия расщепления от величины поля? Найдите правильные волновые функции нулевого приближения.

5. В результате β-распада ядра атома трития образуется ион $^3He^+$. Вычислите вероятности того, что этот ион окажется: (а) в основном состоянии; (б) на первом возбужденном уровне. Каково отношение этих вероятностей?

6. Уровни энергии невозмущённой системы зависят от параметра λ и при некотором значении λ_0 два уровня энергии пересекаются: $E_1^{(0)}(\lambda_0) = E_2^{(0)}(\lambda_0)$. В начальный момент времени система находится на первом уровне в состоянии $\psi_1^{(0)}$. Определите вероятность найти систему в состоянии $\psi_2^{(0)}$ в момент времени t, если

на систему накладывается малое постоянное возмущение $\hat{V}$, причём $V_{11} = V_{22} = 0$, но $V_{12} = V_{21}^* \neq 0$.

7. ^{C} Найдите величину сверхтонкого расщепления основного состояния атома водорода. Вычислите длину волны излучения, испускаемого при переходе между расщепленными подуровнями.

8. ^{C} На мюон, покоящийся в сильном однородном магнитном поле $\vec{\mathcal{H}}_0 \parallel z$, падает слабое циркулярно поляризованное радиочастотное поле $\vec{h}(t) \perp \vec{\mathcal{H}}_0$. Найдите зависимость от времени спиновой функции $|\chi(t)\rangle$ и поляризации мюона $\vec{P}(t) = \langle\chi(t)|\hat{\vec{\sigma}}|\chi(t)\rangle$, если в начальный момент $|\chi(0)\rangle = |+\rangle$.

9. Вывести правила отбора для разрешённых переходов в спектрах ЭПР по спиновым квантовым числам электрона M_S и протона M_I.

10. * Найдите вероятность перехода между состояниями дискретного спектра под действием возмущения

$$\hat{V}(t) = \frac{\hat{V}_0}{2}\left(1 + \frac{2}{\pi}\operatorname{arctg}\frac{t}{\tau}\right).$$

11. ^{C} Найдите уровни энергии и волновые функции стационарных состояний двух невзаимодействующих тождественных частиц в потенциальном ящике

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, \;\; x > a, \end{cases}$$

если этими частицами являются: (а) ферми-частицы со спинами $s = 1/2$; (б) бозе-частицы со спинами $s = 0$; (в) бозе-частицы со спинами $s = 1$. Чему равна в каждом из этих случаев энергия основного состояния N частиц?

2-е ЗАДАНИЕ

УПРАЖНЕНИЯ

1. Докажите справедливость коммутационного соотношения

$$\left[\hat{\vec{L}}^2, \left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{d}_\alpha\right]\right] = 2\left(\hat{\vec{L}}^2\hat{d}_\alpha + \hat{d}_\alpha\hat{\vec{L}}^2\right) - 4\left(\hat{\vec{L}}\hat{\vec{d}}\right)\hat{L}_\alpha,$$

где $\hat{d}_\alpha$ $(\alpha = 1, 2, 3)$ – составляющие оператора дипольного момента атома, а $\hat{\vec{L}}$ – оператор полного орбитального момента ($\hbar = 1$). Используя это соотношение, выведите правила отбора по орбитальному моменту для дипольных переходов в атоме.

2. Покажите, что амплитуда малых колебаний ядер в молекулярных системах составляет $l \sim æa$, где æ – малый параметр Борна–Оппенгеймера, a – характерное межъядерное расстояние.

3. Покажите, что для электронных волновых функций I–го и J–го квантовых состояний $\psi_I(x, X)$ и $\psi_J(x, X)$ справедливо неравенство
$$\langle \psi_I | \frac{\partial \psi_J}{\partial X} \rangle \neq 0,$$
где угловыми скобками обозначено интегрирование по совокупности электронных координат x, а X – совокупность ядерных координат молекулярной системы. Чему равно скалярное произведение при $I = J$?

4. Получите результат действия оператора антисимметризации на произвольную функцию трёх электронов.

5. Доказать эрмитовость оператора Фока.

6. Покажите, что оператор Фока инвариантен относительно произвольного унитарного преобразования молекулярных орбиталей.

ЗАДАЧИ

1. Вычислите энергию основного состояния атома водорода из вариационного принципа. В качестве пробных функций возьмите:
$\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$ и
$\psi(r) = (\pi b^2)^{-3/4} \exp(-r^2/2b^2)$.
Определите параметры a и b.

2. * Найдите, пользуясь вариационным методом, энергию основного состояния гелиеподобного атома с зарядом ядра Z. В качестве пробной функции возьмите:
$$\begin{array}{ll} \text{(а)} & \psi(r_1, r_2) \sim e^{-\alpha(r_1+r_2)}, \\ \text{(б)} & \psi(r_1, r_2) \sim e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}. \end{array}$$
В случае (б) воспользуйтесь численной процедурой минимизации матричного элемента от гамильтониана по параметрам α и β.

Воспользовавшись полученными результатами, установите, существует ли стабильный ион водорода H^-, а также вычислите диамагнитную восприимчивость атома гелия в основном состоянии.

3. Пользуясь правилами Хунда, определите значения квантовых чисел L, S и J в основных состояниях следующих атомов: (а) кремния, (б) фосфора, (в) серы, (г) ванадия, (д) кобальта, (е) церия. Для случаев "а", "б" и "в" найдите все термы. Запишите спектроскопические символы полученных состояний.

4. ^{C} Используя второй порядок стационарной теории возмущений, определите, как зависит энергия взаимодействия от расстояния R между:
(а) атомом и ионом ($\sim -1/R^4$);
(б) двумя атомами ($\sim -1/R^6$).

5. Желтый дублет натрия соответствует оптическим переходам $^2P_{3/2} \to ^2 S_{1/2}$ и $^2P_{1/2} \to ^2 S_{1/2}$. Исследуйте расщепление этого дублета в слабом и сильном магнитных полях. Сравните полученные картины расщепления линий натрия с расщеплениями синглетной линии кадмия, отвечающей переходу $^1D \to {}^1P$.

6. Найти время жизни $2p$-состояния атома водорода.

7. Определите вероятность процесса, при котором ядро, связанное гармоническим потенциалом, останется в основном состоянии после испускания γ-кванта (эффект Мёссбауэра).

8. ^{C} Доказать справедливость формулы для матричного элемента оператора $\hat{\Omega}(1, 2, ..., N)$, симметричного относительно перестановок номеров электронов

$$\langle \Psi' | \hat{\Omega} | \Psi \rangle = \sum_P \varepsilon_P \langle \Pi' | \hat{\Omega} | \hat{P} \Pi \rangle.$$

Здесь Ψ' и Ψ – два слэтеровских детерминанта, построенных на произведениях Π' и Π спин-орбиталей N–электронной системы; $\varepsilon_P = +1$ для чётного числа перестановок электронов оператором $\hat{P}$, $\varepsilon_P = -1$ для нечётного числа перестановок.

9. Получите выражение для хартри–фоковского функционала электронной энергии молекулярных систем с дважды заполненными молекулярными орбиталями.

Срок сдачи первого задания: 15.03–20.03.2021 года.

Срок сдачи второго задания: 10.05–15.05.2021 года.

Задачи со значком ^{C} необходимо рассмотреть на семинаре.

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
15 января 2021 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Объектно-ориентированное программирование**
по направлению: 03.03.01 «Прикладные математика и физика»
физтех-школа: **ФБМФ**
кафедра: **информатики и вычислительной математики**
курс: 3
семестр: 6

Трудоёмкость:
вариативная часть – 3 зач. ед.;
лекции – нет
практические (семинарские) занятия – нет
лабораторные занятия – 60 часов

Диф. зачет – 6 семестр
Самостоятельная работа – 75 часов

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ – 60

Программу и задание составил: ассистент Е. С. Максимов
ст. преп. Т. Ф. Хирьянов

Программа принята на заседании кафедры
информатики и вычислительной математики
23 июня 2020 г.

Заведующий кафедрой
к.ф.-м.н., доц. Н. И. Хохлов

Описание учебного курса

Цель дисциплины «Объектно-ориентированное программирование» — научить обучающихся использованию языка программирования Python, включая его уникальные особенности синтаксиса и библиотеки, для решения прикладных и научных задач.

В ходе данного курса обучающийся освоит использование следующих технологий и библиотек:

1. Работа в командной строке Linux.
2. Использование системы контроля версия git.
3. Обработка исключений на языке Python.
4. Использование аргументов командной строки.
5. Использование итерируемых объектов.
6. Генераторы и сопроцессы на Python.
7. Декорирование функций и классов.
8. Объектно-ориентированное программирование.
9. Сериализация и десериализация объектов.
10. Использование регулярных выражений для работы со строками.
11. Многопоточное программирование.

Курс предполагает реализацию семестрового проекта, выполненного в коллаборации с сокурсниками. Выполнение проекта подразумевает ознакомление с рядом библиотек **Python**, описания которых появляются на сайте **http://cs.mipt.ru/advanced_python** в течение семестра. Очное присутствие на занятиях по ООП обязательно, поскольку суть обучения на данном курсе сводится не к приобретению знаний, но к усвоению навыка программирования и проектирования программ. Это возможно только при живой передаче опыта от преподавателя и его ассистентов-менторов — студентам.

Также важной частью курса является обучение использованию системы контроля версий. Дистанционное взаимодействие обучающихся и преподавателя также является важной составляющей частью обучения и происходит через репозиторий git. Отсутствие коммитов в репозиторий (если оно предполагалось лабораторной работой) или отсутствие реакции на замечания преподавателя к коду является таким же дисциплинарным нарушением, как и непосещение занятий. Сдача выполненных работ на «флешке» или по электронной почте не допускается.

Оценивание

Итоговая оценка студента по предмету ставится исходя из устной защиты семестрового проекта.

Лабораторные работы

№	Тема	Описание	Недель
1	Git	Системы контроля версий. Использование команд git init; git config; git add; git commit; git push; git pull; git branch; git checkout. Использование github.com задачи, цели, нити.	1
2	Библиотека numpy	Использование библиотеки numpy для работы с матрицами. Их создание, индексирование, обращение, транспонирование. Вычисление ранга, определителя, собственных чисел и векторов.	1
3	Библиотека pandas	Библиотека pandas. Создание DataFrame. Проведение первичного анализа данных в таблице: расчёт количества, среднего, стандартного отклонения, медиану, квантили, диапазон.	1
4	Научная визуализация средствами python	Примеры использования matplotlib.pyplot для визуальзации двумерных графиков и диаграмм; библиотеки для трехмерной графики mpl_toolkits.mplot3d.Axes3D; библиотека matplotlib.animation для создания анимаций.	1
5	Базы данных	Введение в реляционные базы данных и язык SQL. Использование SQLite 3 из коммандной строки и при помощи библиотеки sqlite3 для Python	2
6	Создание web сайтов	Фреймворк flask для создания сайтов в Python. Использование flask.Blueprits для разделения сайта на модули. Введение в синтаксис HTML, CSS, Jinja2	2
7	PyQt5	Использование библиотеки PyQT5 для создания графических приложений (со строками меню, кнопками и пр. Использование QtDesigner.	2
8	Введение в машинное обучение	Общая постановка задачи обучения по прецедентам. Типы задач Машинного обучения. Обучение с учителем и без учителя. Метрики качества. Задача Классификации. k-NN. Плюсы и минусы метода ближайших соседей. Класс KNeighborsClassifier в Scikit-learn. Дерево решений. Построение дерева. Основные параметры дерева. Плюсы и минусы деревьев решений. Класс DecisionTreeClassifier в Scikit-learn. Выбор параметров модели и кросс-валидация.	4

Ресурсы сети Интернет

1. cs.mipt.ru/advanced_python
2. https://tatyderb.gitbooks.io/python-express-course/content/
3. python.org
4. github.com
5. pythontutor.ru
6. https://www.coursera.org/learn/programming-in-python
7. https://www.coursera.org/learn/python-osnovy-programmirovaniya
8. https://stepik.org/course/512/syllabus

Литература

(*Основная*)

1. Программирование на Python 3: Подробное руководство: [учеб. пособие для вузов]. М. Саммерфилд; пер. с англ. А. Киселева .— Санкт-Петербург : Символ-Плюс, 2015 - ISBN 978-5-93286-161-5.

(Д*ополнительная*)

1. Лутц М. Изучаем Python, 4-е изд. / пер. с англ. – Санкт-Петербург : Символ-Плюс, 2011. – 1280 с., ил. ISBN 978-5-93286-159-2
2. Лутц М. Программирование на Python, 4-е изд. I том / пер. с англ. – Санкт-Петербург : Символ-Плюс, 2011 — 992 с., ил. ISBN 978-5-93286-210-0, 978-0-596-15810-1
3. Лутц М. Программирование на Python, 4-е изд. II том / пер. с англ. – Санкт-Петербург : Символ-Плюс, 2011. – 992 с. ISBN 978-5-93286-211-7, 978-0-596-15810-1.

Учебное издание

СБОРНИК
программ и заданий

Физтех-школа биологической и медицинской физики (ФБМФ)

для студентов 3 курса
на весенний семестр
2020–2021 учебного года

Редакторы и корректоры: *И.А. Волкова, О.П. Котова*
Компьютерная верстка *Н.Е. Кобзева*

Подписано в печать 15.01.2021. Формат 60 × 84 $^{1}/_{16}$. Усл. печ. л. 2,5. Тираж 80 экз.
Заказ № 25.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. (495) 408-58-22, e-mail: rio@mipt.ru

Отдел оперативной полиграфии «Физтех-полиграф»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. (495) 408-84-30, e-mail: polygraph@mipt.ru