

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

|                            |   |
|----------------------------|---|
|                            | <b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>  |
| <b>по дисциплине:</b>      | Практикум по вычислительной теплофизике   |
| <b>по направлению:</b>     | Прикладные математика и физика  |
| <b>профиль подготовки:</b> | Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы<br>Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики<br>кафедра физики высокотемпературных процессов |
| <b>курс:</b>               | 4   |
| <b>квалификация:</b>       | бакалавр  |

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 15 час.

Всего часов: 45, всего зач. ед.: 1

Программу составили:

В.В. Писарев, канд. физ.-мат. наук, доцент

С.А. Захаров, ассистент

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 12.02.2024

## Аннотация

Курс «Практикум по вычислительной теплофизике» предназначен для обучения студентов навыкам программной реализации численных методов для решения физических задач.

Задачи курса:

- знакомство с задачами теплофизики, для решения которых требуются вычислительные методы и подходы
- рассмотрение некоторых вычислительных методов, актуальных для решения задач вычислительной теплофизики
- знакомство с особенностями и парадигмами языка программирования Julia, ценными для научных и технических вычислений
- приобретение практических навыков реализации вычислительных методов на языке программирования высокого уровня
- приобретение навыков анализа свойств численных алгоритмов

По результатам освоения курса студент должен:

знать:

Основные вычислительные методы, применяемые в задачах теплофизики. Сравнительные преимущества и недостатки различных численных методов для физических задач.

уметь:

Выбирать подходящие вычислительные методы для решения физических задач. Реализовывать численные методы на языках программирования высокого уровня.

владеть:

навыками программирования на языке Julia в области реализации численных методов. Навыками использования библиотек для инженерно-научных вычислений.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

- 1 Введение. Обзор задач теплофизики, требующих численного решения. Обзор языка Julia
- 2 Интерполяция
- 3 Решение нелинейных уравнений
- 4 Численные квадратуры
- 5 Задача Коши для ОДУ
- 6 Численное решение уравнений в частных производных
- 7 Методы решения систем уравнений.
- 8 Методы численной оптимизации

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

- выработка у студентов навыков программной реализации численных методов для решения физических задач в области теплофизики.

### Задачи дисциплины

- знакомство с задачами теплофизики, для решения которых требуются вычислительные методы и подходы;
- рассмотрение некоторых вычислительных методов, актуальных для решения задач вычислительной теплофизики;
- знакомство с особенностями и парадигмами языка программирования Julia, ценными для научных и технических вычислений;
- приобретение практических навыков реализации вычислительных методов на языке программирования высокого уровня;
- приобретение навыков анализа свойств численных алгоритмов.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

| Код и наименование компетенции  | Индикаторы достижения компетенции   |
|---|---|
| ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования | ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов |

## 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные вычислительные методы, применяемые в задачах теплофизики. Сравнительные преимущества и недостатки различных численных методов для физических задач.

уметь:

- выбирать подходящие вычислительные методы для решения физических задач. Реализовывать численные методы на языках программирования высокого уровня.

владеть:

- навыками программирования на языке Julia в области реализации численных методов. Навыками использования библиотек для инженерно-научных вычислений.

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

| №                     | Тема (раздел) дисциплины  | Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час. |          |                 |                |
|-----------------------|---|---|----------|-----------------|----------------|
|                       |   | Лекции  | Семинары | Лаборат. работы | Самост. работа |
| 1                     | Введение  |   | 2        |                 | 2              |
| 2                     | Интерполяция  |   | 4        |                 | 2              |
| 3                     | Решение нелинейных уравнений  |   | 4        |                 | 2              |
| 4                     | Численное интегрирование  |   | 4        |                 | 2              |
| 5                     | Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений |   | 4        |                 | 2              |
| 6                     | Уравнения в частных производных   |   | 2        |                 | 2              |
| 7                     | Решения нелинейных систем   |   | 6        |                 | 2              |
| 8                     | Численная оптимизация   |   | 4        |                 | 1              |
| Итого часов           |   |   | 30       |                 | 15             |
| Подготовка к экзамену |   | 0 час.  |          |                 |                |
| Общая трудоёмкость    |   | 45 час., 1 зач.ед.  |          |                 |                |

### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 8 (Весенний)

#### 1. Введение

Обзор некоторых задач теплофизики, не имеющих аналитического решения. Язык программирования Julia: обзор основных возможностей, сходства и отличия с Matlab, Python+Numpy.

## 2. Интерполяция

Кусочно-линейная и полиномиальная интерполяция. Интерполяция табличных данных.

## 3. Решение нелинейных уравнений

Метод бисекции. Метод секущих и его вариации: regula falsi, метод Риддерса, метод Брента. Метод Ньютона. Скорость сходимости. Применение численных методов для расчета кривой фазового равновесия – кривая испарения жидкости ван-дер-Ваальса. Поиск корней многочленов методом Ньютона.

## 4. Численное интегрирование

Квадратурные формулы Ньютона-Котеса. Квадратурные формулы Гаусса. Численное интегрирование с контролем точности: метод Ромберга (интегрирование с равномерной сеткой), расширения Кронрода для формул Гаусса.

## 5. Численное решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений

Методы Рунге-Кутты, таблица Бутчера. Схема Верле для задач гамильтоновой динамики. Методы Адамса. Расчет динамики химических реакций методами Рунге-Кутты. Реализация динамики частиц со схемой Верле.

## 6. Уравнения в частных производных

Схемы для уравнения Пуассона, уравнения теплопроводности в 1D и 2D. Гиперболические уравнения и системы. Обсуждение вывода формул в представлении метода конечных разностей, конечных объемов, конечных элементов. Явные и неявные схемы. Свойства численных схем: аппроксимация, устойчивость, сходимость, монотонность, консервативность. Аппроксимация граничных условий.

## 7. Решения нелинейных систем

Решение линейных систем: разложения матриц, метод прогонки, релаксационные методы, метод сопряженных градиентов.

Решение нелинейных систем: метод Ньютона, метод сопряженных градиентов.

Применение солверов линейных систем для неявных схем решения уравнений Пуассона и теплопроводности.

## 8. Численная оптимизация

Численная оптимизация: поиск экстремума функции одной переменной, минимизация вдоль направления, метод Ньютона и квазиньютоновские методы. Приложение к задачам химического равновесия, фазового равновесия в многокомпонентной системе, уравнениям в частных производных.

## 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор).

## 6.Перечень рекомендуемой литературы

## Основная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. - М.: Наука, 1989.
2. Рябенский В.С. Введение в вычислительную математику. - 3-е изд. - М.:Физматлит, 2016.
3. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. - 7-е изд. - М.: Бином, 2018.

## Дополнительная литература

Литература выдается на кафедре:

1. Lobianco A. Julia Quick Syntax Reference. - Apress, 2019.
2. Scherer P. Computational physics: simulation of classical and quantum systems. - Springer, 2017.
3. Turner P.R., Arildsen Th., Kavanagh K. Applied scientific computing with Python. - Springer, 2018.

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

MIT OpenCourseWare

<https://ocw.mit.edu/courses/aeronautics-and-astronautics/16-90-computational-methods-in-aerospace-engineering-spring-2014/numerical-methods-for-partial-differential-equations/>

Документация языка программирования Julia: <https://docs.julialang.org>

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

компьютеры с установленной ОС CentOS GNU/Linux

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

|                            |   |
|----------------------------|---|
| <b>по направлению:</b>     | Прикладные математика и физика  |
| <b>профиль подготовки:</b> | Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы<br>Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики<br>кафедра физики высокотемпературных процессов |
| <b>курс:</b>               | <u>4</u>  |
| <b>квалификация:</b>       | бакалавр  |

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Дифференцированный зачет

**Разработчики:**

В.В. Писарев, канд. физ.-мат. наук, доцент

С.А. Захаров, ассистент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

| Код и наименование компетенции  | Индикаторы достижения компетенции   |
|---|---|
| ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования | ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов |

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Практикум по вычислительной теплофизике» обучающийся должен:

### знать:

- основные вычислительные методы, применяемые в задачах теплофизики. Сравнительные преимущества и недостатки различных численных методов для физических задач.

### уметь:

- выбирать подходящие вычислительные методы для решения физических задач. Реализовывать численные методы на языках программирования высокого уровня.

### владеть:

- навыками программирования на языке Julia в области реализации численных методов. Навыками использования библиотек для инженерно-научных вычислений.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия или в конце занятия по пройденной теме.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов:

1. Порядок интерполяционной формулы. Интерполяционный полином в форме Лагранжа. Алгоритм Невилла.
2. Порядок сходимости метода поиска корня уравнений. Эмпирический способ определения порядка сходимости.
3. Квадратурные формулы с оценкой погрешности.
4. Таблицы Бутчера для популярных явных методов Рунге-Кутты 1-4 порядков. Порядки аппроксимации и число вычислений правой части в методах Рунге-Кутты высоких порядков.
5. Симплектические схемы для задачи Коши. Схема Верле. Эквивалентность схем Верле в координатной и скоростной формах.
6. Явная и неявная схемы Эйлера для уравнения теплопроводности.
7. Численная схема для двумерного уравнения Пуассона. Метод решения.
8. Метод сопряженных градиентов для линейных систем.
9. Метод Ньютона и квазиньютоновские методы в задачах оптимизации. Разложение Холецкого.
10. Методы оптимизации для задач большой размерности.

Примеры практических заданий:

1. Написать реализацию явного метода Рунге-Кутты по таблице Бутчера.
2. Используя имеющуюся реализацию метода поиска корня уравнения, определить порядок сходимости метода.

3. Записать систему уравнений движения в виде системы дифференциальных уравнений I порядка и получить решение, воспользовавшись эталонной реализацией солвера.
4. Программная реализация метода трехдиагональной прогонки.
5. Программная реализация поиска с возвратом для приближенной одномерной минимизации.

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.