

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау**

А.В. Рогачев

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Основы численного моделирования физических процессов (C++/Python)
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика и педагогика
	Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
	Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	2
квалификация:	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

3 (осенний) - Дифференцированный зачет

4 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 120 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 90 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Количество контрольных работ, заданий: 2

Программу составили:

М.М. Шевелёв, канд. физ.-мат. наук, доцент

Д.А. Лисицын, ассистент

Программа обсуждена на заседании Физтех-кластера академической и научной карьеры 01.04.2024

Аннотация

Данная дисциплина нацелена на формирование базового навыка использования неуправляемого императивного компилируемого языка программирования для численного моделирования физических процессов. Как неотъемлемые части компетенции в области численного моделирования в курсе затрагиваются такие вопросы как организация исходного кода, обработка и представление результатов численного моделирования, умение делать выводы на основе полученных результатов и отличать значимые результаты от артефактов. Дисциплина носит практический характер: предлагаются математические модели физических систем и набор открытых вопросов, ответы на которые можно получить путём численного моделирования. В первой половине курса рассматриваются механические системы с одной и двумя степенями свободы, простейшие методы численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, представление и анализ результатов с использованием библиотек Matplotlib и NumPy. Вторая половина курса посвящена анализу механических систем с многими телами и случайным блужданиям, методу Монте-Карло и генераторам псевдослучайных чисел, простейшему Фурье-анализу.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Формирование базовых навыков использования неуправляемого императивного компилируемого языка для численного моделирования физических процессов, представления и обработки результатов моделирования.

Задачи дисциплины

- формирование навыков конструирования кода на языке C++ для численного моделирования физических систем;
- получение студентами навыков по представлению и обработке полученных результатов на языке Python;
- приобретение студентами базовых знаний о численном решении ОДУ, работе с числами с плавающей точкой, генераторах псевдослучайных чисел, методе Монте-Карло и Фурье-анализе;
- формирование умений и навыков применять полученные знания для самостоятельного решения задач численного моделирования.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.4 Владеет навыками работы с компьютером и компьютерными сетями с целью получения, хранения и обработки научной (технической, технологической) информации

ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.3 Способен к профессиональной эксплуатации современной экспериментальной научно-исследовательской (измерительно-аналитической и технологической) аппаратуры
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- классические алгоритмы для выполнения аккумулятивных операций с плавающей точкой;
- простейшие методы численного решения ОДУ первого и второго порядков;
- базовые методы и подходы, используемые в языке C++, для организации легко сопровождаемого кода;
- базовые методы чтения, записи и преобразования данных с использованием библиотеки NumPy;
- основные возможности библиотеки Matplotlib по графическому представлению данных;
- принципы построения и ограничения применимости генераторов псевдослучайных чисел;
- базовые принципы построения и оценки точности алгоритмов моделирования на базе метода Монте-Карло.

уметь:

- самостоятельно конструировать код на языке C++ для численного моделирования на основе предложенных математических моделей;
- производить оценку точности вычислений с плавающей точкой;
- оценивать значимость полученных результатов и находить артефакты численной модели;
- выдвигать и проверять гипотезы о поведении системы на основе полученных результатов моделирования;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям;
- эффективно использовать возможности библиотек NumPy и Matplotlib для последующей обработки и представления результатов.

владеть:

- базовыми навыками по созданию гибкого и легко поддерживаемого кода на языке C++;
- навыками грамотной обработки результатов и сопоставления с аналитическими решения и экспериментальными данными;
- навыком самостоятельной работы с научным материалом: статьи, монографии, обзоры;
- культурой графического представления результатов численного моделирования.

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	Знакомство с вводом и выводом данных в формате ASCII на C++ и Python	1		5	2
2	Работа с числами с плавающей точкой	2		5	4
3	Одномерное движение в параболическом потенциале	1		5	2
4	Использование шаблонов C++ для повышения гибкости кода	2		5	4
5	Одномерное движение в периодическом потенциале	1		5	2
6	Использование библиотеки Matplotlib для представления данных	2		5	4
7	Одномерное движение с потерями в периодическом потенциале	2		5	4
8	Использование возможностей библиотеки NumPy для первичной обработки результатов вычислений	2		5	4
9	Одномерное движение в периодическом потенциале с вынуждающей силой	2		5	4
10	Знакомство с генераторами псевдослучайных чисел	5		15	10
11	Применение методов семейства Монте-Карло для описания поведения систем многих тел	5		15	10
12	Знакомство с некоторыми дополнительными возможностями средств из языка Python	5		15	10
Итого часов		30		90	60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		180 час., 4 зач.ед.			

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

Семестр: 3 (Осенний)

1. Знакомство с вводом и выводом данных в формате ASCII на C++ и Python

Стандартные возможности форматированного ввода-вывода в языке C++: `std::istream`, `std::ostream`, `std::ifstream`, `std::ofstream`, манипуляторы, перегрузка операторов ввода-вывода. Возможности чтения и записи ASCII данных в Python с использованием библиотеки NumPy: функции `numpy.savetxt`, `numpy.loadtxt`.

2. Работа с числами с плавающей точкой

Внутреннее представление чисел с плавающей точкой. “Машинное эpsilon”. Нормализованные и денормализованные числа с плавающей точкой. Равносильные преобразования: TwoSum и TwoProduct. Влияние на точность аккумулирующих операций. Алгоритмы улучшения точности аккумулирующих операций: суммирование Кехена, схема Горнера. Fused-multiply-accumulate операция.

3. Одномерное движение в параболическом потенциале

Решение уравнения движения простейшим одношаговым методом Эйлера. Представление решения на фазовой плоскости. Проверка точности сохранения интегралов движения и сравнения решений методом Эйлера с аналитическим.

4. Использование шаблонов C++ для повышения гибкости кода

Шаблоны C++ как способ описания численной схемы независимым от типа данных способом. Шаблон для комплексного числа. Обобщённые алгоритмы на базе шаблонов. Разделение численной схемы и деталей математической модели с помощью шаблонов.

5. Одномерное движение в периодическом потенциале

Схемы второго порядка для численного решения уравнений движения: неявный метод Хьюна и явный метод “предиктор-корректор”, метод Хойна. Использование методов второго порядка для решения уравнений движения в периодическом потенциале. Качественная зависимость движения от начального условия: финитные и инфинитные траектории в фазовом пространстве, сепаратриса. Сравнение малых колебаний в периодическом потенциале с колебаниями в параболическом потенциале. Зависимость периода колебаний от начальных условий.

6. Использование библиотеки Matplotlib для представления данных

Создание одномерных графиков зависимостей одной величины от другой. Ручная настройка пределов значений по осям: Axes.set_xlim, Axes.set_ylim. Управление масштабом осей. Ручная настройка шрифтов. Подписи к осям и к графику: plot.title, Axes.set_title. Использование простейших ключевых конструкций LaTeX в подписях к осям. Вывод нескольких кривых на один график и легенда. Сдвоенные графики -- subplots.

7. Одномерное движение с потерями в периодическом потенциале

Сравнение фазовых траекторий одномерного движения с потерями и без потерь для различных начальных условий.

8. Использование возможностей библиотеки NumPy для первичной обработки результатов вычислений

Использование подпрограммы numpy.polyfit для приближения данных полиномом с наименьшей суммой квадратов отклонений. Использование модуля numpy.linalg для задач линейной алгебры и простейшей статистики: вычисление стандартного отклонения и математического ожидания, решение систем линейных уравнений, вычисление определителей и собственных значений.

9. Одномерное движение в периодическом потенциале с вынуждающей силой

Исследование фазовых траекторий системы в случае периодической гармонической вынуждающей силы. Поиск резонансов. Поведение системы при наличии потерь и без потерь. Исследование фазовых траекторий системы в случае периодической негармонической вынуждающей силы. Сравнение поведения системы с негармонической и гармоническими внешними силами.

10. Знакомство с генераторами псевдослучайных чисел

Принципы работы генераторов псевдослучайных числовых последовательностей (ГПСЧ). Особенности использования ГПСЧ в C++ (std::rand, randomization, engine/distribution компоненты STL). Инструментарий python для работы с данными распределений. Генераторы случайных чисел с произвольным заданным распределением. Оценка качества ГПСЧ. Использование ГПСЧ для оценки величин определённых интегралов.

11. Применение методов семейства Монте-Карло для описания поведения систем многих тел

Хаотическое движение динамических систем. Точечные отображения при моделировании биологических и экологических систем. Постоянные Фейгенбаума. Движение шарика между неподвижной и осциллирующей стенками. Случай регулярного и хаотического движения. Моделирование физических процессов методами семейства Монте-Карло. Задача о случайных блужданиях и связь параметров процесса переноса в ней с коэффициентом диффузии и транспортными коэффициентами (пропускание/поглощение) в среде. Модель одномерного идеального газа и определение в ней термодинамических параметров системы. Случай многокомпонентного идеального одномерного газа. Случай наличия в системе внешней силы на примере заряженных частиц газа во внешнем электрическом поле. Неравновесное распределение частиц по скоростям. Способы решения задачи детектирования столкновений в многомерном случае. Влияние потенциала взаимодействия частиц на термодинамические параметры системы. Адиабатические процессы в модели. Двумерный газ.

12. Знакомство с некоторыми дополнительными возможностями средств из языка Python

Знакомство с популярными средствами для работы с научными данными: scipy(sympy, pandas), multiprocessing, h5py, numba. Примеры применения этих средств для решения задачи обработки сигналов, анализа экспериментальных данных, преобразования выражений символьной математики, организации пакетного запуска задач, использования распространенных форматов бинарных контейнеров для хранения и передачи данных.

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

Компьютерный класс и подключаемое к компьютеру мультимедийное оборудование для демонстрации визуальных материалов (проектор или широкоформатный телевизор).

Доступ к сети Интернет для доступа к актуальным версиям документации.

Необходимое программное обеспечение: POSIX совместимая операционная система семейства Linux, gnu compiler collection с компилятором c++, удовлетворяющим стандарту C++17 и выше, gdb, gprof, окружение python3 версии 3.8 и выше, совместимые версии библиотек NumPy, Matplotlib, Scipy, среда разработки Code Blocks версии 20.0 и выше, среда разработки Spyder.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. C++ : базовый курс [Текст] : [учеб. пособие для вузов] / Г. Шилдт ; пер. с англ. и ред. Н. М. Ручко. — 3-е изд. — М. : Вильямс, 2015, 2016. — 624 с.
2. Задачи по курсу "Основы вычислительной физики" [Текст] : учеб. пособие для вузов / Н. Н. Елкин ; М-во образования и науки Рос. Федерации, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т. — 2-е изд., испр. — М. : Изд-во МФТИ, 2006. — 144 с.

Дополнительная литература

1. Введение в численные методы [Текст] / А. А. Самарский - М. Наука, 1987
2. Компьютерное моделирование в физике [Текст] : в 2 ч. Ч. 1 : [учеб. пособие для вузов] / Х. Гулд, Я. Тобочник ; пер. с англ. А. Н. Полудова, В. А. Панченко. — М. : Мир, 1990. — 349 с.

3. Компьютерное моделирование в физике [Текст] : в 2 ч. Ч. 2 : [учеб. пособие для вузов] / Х. Гулд, Я. Тобочник ; пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко .— М. : Мир, 1990 .— 400 с.
4. Изучаем Python, программирование игр, визуализация данных, веб-приложения/Эрик Мэтиз, Python Crash Course,-Санкт-Петербург, Питер, 2020
5. Новые сложные задачи на C++ [Текст], 40 новых головоломных задач с решениями/Г. Саттер, Exceptional C++ Style, -М., ООО "И. Д. Вильямс", 2016

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

<https://docs.python.org/3/> -документация python

<https://www.scipy.org/docs.html> - scipy документация, содержит numpy,matplotlib, pandas

https://www.phys.uconn.edu/~rozman/Courses/P2200_15F/downloads/floating-point-guide-2015-10-15.pdf - краткий обзор особенностей, связанных с числами с плавающей точкой

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

Демонстрация презентаций формата .pdf Adobe Reader или Evince. Демонстрация фрагментов исходного кода стандартными средствами операционной системы.

Использование gnu compiler collection компилятора для компиляции демонстрационных программ.

При необходимости ведения дистанционных занятий предполагается задействовать Google Meet на домене phystech.edu и Zoom.

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 и понятия, 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 преподавателю.

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

Литература для самостоятельного изучения:

1. Марк Лутц «Изучаем Python». 5-е изд. 2019.
2. Галовиц Я. C++17 STL Стандартная библиотека шаблонов. – Санкт-Петербург: Питер, 2018

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика и педагогика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	<u>2</u>
квалификация:	бакалавр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

- 3 (осенний) - Дифференцированный зачет
- 4 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

М.М. Шевелёв, канд. физ.-мат. наук, доцент
Д.А. Лисицын, ассистент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.4 Владеет навыками работы с компьютером и компьютерными сетями с целью получения, хранения и обработки научной (технической, технологической) информации
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.3 Способен к профессиональной эксплуатации современной экспериментальной научно-исследовательской (измерительно-аналитической и технологической) аппаратуры
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Основы численного моделирования физических процессов (C++/Python)» обучающийся должен:

знать:

- классические алгоритмы для выполнения аккумулятивных операций с плавающей точкой;
- простейшие методы численного решения ОДУ первого и второго порядков;
- базовые методы и подходы, используемые в языке C++, для организации легко сопровождаемого кода;
- базовые методы чтения, записи и преобразования данных с использованием библиотеки NumPy;
- основные возможности библиотеки Matplotlib по графическому представлению данных;
- принципы построения и ограничения применимости генераторов псевдослучайных чисел;
- базовые принципы построения и оценки точности алгоритмов моделирования на базе метода Монте-Карло.

уметь:

- самостоятельно конструировать код на языке C++ для численного моделирования на основе предложенных математических моделей;
- производить оценку точности вычислений с плавающей точкой;
- оценивать значимость полученных результатов и находить артефакты численной модели;
- выдвигать и проверять гипотезы о поведении системы на основе полученных результатов моделирования;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям;
- эффективно использовать возможности библиотек NumPy и Matplotlib для последующей обработки и представления результатов.

владеть:

- базовыми навыками по созданию гибкого и легко поддерживаемого кода на языке C++;
- навыками грамотной обработки результатов и сопоставления с аналитическими решения и экспериментальными данными;
- навыком самостоятельной работы с научным материалом: статьи, монографии, обзоры;
- культурой графического представления результатов численного моделирования.

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

Студенты выполняют контрольные задания в виде проектов по 1-2 занятия каждый.

Примерные названия проектов:

3 семестр

1. Провести численное решение уравнения движения простейшим одношаговым методом Эйлера. Представить решение на фазовой плоскости. Провести проверку точности сохранения интегралов движения. Сравнить полученное решение с аналитическим.
2. Численно исследовать резонанс в нелинейном маятнике с затуханием под действием гармонической вынуждающей силы.

4 семестр

1. Реализовать модель процесса одномерных случайных блужданий с дискретной величиной шага $\{+/-1\}$ в дискретном времени. Проанализировать связь удаления/ модуля удаления/ среднего квадрата удаления блуждающих от точки старта с числом шагов.
2. Проанализировать изменение распределения скоростей частиц одномерного газа со временем в зависимости от соотношения масс компонентов газа

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

3 семестр

1. Стандартные возможности форматированного ввода-вывода в языке C++. Возможности чтения и записи ASCII данных в Python с использованием библиотеки NumPy.
2. Внутреннее представление чисел с плавающей точкой. Нормализованные и денормализованные числа с плавающей точкой.

3. Влияние модели чисел с плавающей точкой на точность аккумулирующих операций. Алгоритмы улучшения точности аккумулирующих операций: суммирование Кехена, схема Горнера.
4. Решение уравнения движения простейшим одношаговым методом Эйлера. Представление решения на фазовой плоскости. Оценка точности решения.
5. Шаблоны C++ как способ описания численной схемы независимым от типа данных способом. Обобщённые алгоритмы на базе шаблонов. Разделение численной схемы и деталей математической модели с помощью шаблонов.
6. Схемы второго порядка для численного решения уравнений движения: неявный метод Хьюна и явный метод “предиктор-корректор”, метод Хойна. Использование методов второго порядка для решения уравнений движения в периодическом потенциале.
7. Качественная зависимость движения от начального условия: финитные и инфинитные траектории в фазовом пространстве, сепаратриса. Сравнение малых колебаний в периодическом потенциале с колебаниями в параболическом потенциале. Зависимость периода колебаний от начальных условий. Сравнение фазовых траекторий одномерного движения с потерями и без потерь для различных начальных условий.
8. Фазовые траектории системы в случае периодической гармонической вынуждающей силы. Поиск резонансов. Поведение системы при наличии потерь и без потерь.
9. Фазовые траектории системы в случае периодической негармонической вынуждающей силы. Сравнение поведения системы с негармонической и гармоническими внешними силами.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Стандартные возможности форматированного ввода-вывода в языке C++. Возможности чтения и записи ASCII данных в Python с использованием библиотеки NumPy.
2. Схемы второго порядка для численного решения уравнений движения: неявный метод Хьюна и явный метод “предиктор-корректор”, метод Хойна. Использование методов второго порядка для решения уравнений движения в периодическом потенциале.

Билет 2.

1. Внутреннее представление чисел с плавающей точкой. Нормализованные и денормализованные числа с плавающей точкой.
2. Качественная зависимость движения от начального условия: финитные и инфинитные траектории в фазовом пространстве, сепаратриса. Сравнение малых колебаний в периодическом потенциале с колебаниями в параболическом потенциале.

Билет 3.

1. Влияние модели чисел с плавающей точкой на точность аккумулирующих операций. Алгоритмы улучшения точности аккумулирующих операций: суммирование Кехена, схема Горнера.
2. Зависимость периода колебаний от начальных условий. Сравнение фазовых траекторий одномерного движения с потерями и без потерь для различных начальных условий.

Билет 4.

1. Решение уравнения движения простейшим одношаговым методом Эйлера. Представление решения на фазовой плоскости.
2. Фазовые траектории системы в случае периодической гармонической вынуждающей силы. Поиск резонансов. Поведение системы при наличии потерь и без потерь.

Билет 5.

1. Шаблоны C++. Обобщённые алгоритмы на базе шаблонов. Разделение численной схемы и деталей математической модели с помощью шаблонов.
2. Фазовые траектории системы в случае периодической негармонической вынуждающей силы. Сравнение поведения системы с негармонической и гармоническими внешними силами.

4 семестр

1. Принципы работы генераторов псевдослучайных числовых последовательностей(ГПСЧ). Особенности использования ГПСЧ в C++. Инструментарий python для работы с данными распределений.
2. Генераторы случайных чисел с произвольным заданным распределением. Оценка качества ГПСЧ. Использование ГПСЧ для оценки величин определённых интегралов.
3. Хаотическое движение динамических систем. Точечные отображения при моделировании биологических и экологических систем.
4. Динамический Хаос. Постоянные Фейгенбаума. Движение шарика между неподвижной и осциллирующей стенками.
5. Метод молекулярной динамики для моделирования свойств газа и жидкости. Методы семейства Монте-Карло. Моделирование процессов переноса.
6. Модель одномерного идеального газа и определение в ней термодинамических параметров системы. Случай многокомпонентного идеального одномерного газа.
7. Случай наличия в системе внешней силы на примере заряженных частиц газа во внешнем электрическом поле. Неравномерное распределение частиц по скоростям.
8. Влияние потенциала взаимодействия частиц в газе на термодинамические параметры системы. Адиабатические процессы в модели.
9. Модель двумерного газа. Способы решения задачи детектирования столкновений в пространствах размерности больше 1.
10. Расширенные средства языка python для работы с данными вычислительных экспериментов.

Примеры контрольных заданий:

1. Реализовать суммирование первых N элементов числовой последовательности наивным методом, с помощью схемы Горнера и с помощью метода Кехана. Применить данные методы к геометрической последовательности с фактором $\frac{1}{2}$ и $\frac{1}{3}$, и к элементам гармонической последовательности. Объяснить наблюдаемые результаты.
2. Провести численное решение уравнения движения простейшим одношаговым методом Эйлера. Представить решение на фазовой плоскости.
3. Продемонстрировать моделирование сценариев перехода к хаосу на примере точечного отображения.
4. Реализовать модель процесса одномерных случайных блужданий с дискретной величиной шага $\{+/-1\}$ в дискретном времени.
5. Моделирование методом Монте-Карло процессов переноса в газе.

Билет 1.

1. Генераторы псевдослучайных числовых последовательностей. Принципы работы с ГПСЧ. ГПСЧ в C++. Оценка качества ГПСЧ.
2. Модель одномерного идеального газа. Термодинамических параметров системы.

Билет 2.

1. Генераторы случайных чисел с произвольным заданным распределением. Оценка качества ГПСЧ. Использование ГПСЧ для оценки величин определённых интегралов.
2. Многокомпонентный идеальный газ. Неравномерное распределение частиц по скоростям.

Билет 3.

1. Хаотическое движение динамических систем. Точечные отображения при моделировании биологических и экологических систем.
2. Влияние потенциала взаимодействия частиц в газе на термодинамические параметры системы. Адиабатические процессы в модели.

Билет 4.

1. Динамический Хаос. Постоянные Фейгенбаума. Движение шарика между неподвижной и осциллирующей стенками.
2. Модель двумерного газа. Способы решения задачи детектирования столкновений в пространствах размерности больше 1.

Билет 5.

1. Метод молекулярной динамики для моделирования свойств газа и жидкости. Методы семейства Монте-Карло. Моделирование процессов переноса.
2. Расширенные средства языка python для работы с данными вычислительных экспериментов.

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

Дифференцированный зачёт (3 семестр) и экзамен (4 семестр) проводятся в устной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении дифференцированного зачёта и экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.