НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ІНСТИТУТ ЯДЕРНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Заступник директора з наукової роботи
_____________ В. В. Давидовський
«5» 07 2023 р.

НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛІНИ

Числові методи математичної фізики

Освітньо-кваліфікаційний рівень: *доктор філософії*
Галузь знань: 10 - *Природничі науки*
Спеціальність : *104 – Фізика та астрономія*
Освітня програма: *Фізика ядра, фізика елементарних частинок і високих енергій; ядерно-фізичні установки; радіаційна фізика конденсованого стану; фізика плазми і ядерного синтезу.*
Статус курсу: ***фаховий (вибірковий)***

Київ 2023

Числові методи математичної фізики: Навчально-методичний комплекс дисципліни. – Київ: ІЯД НАНУ, 2023. - 12 с.

Укладач: Ю.В. Яковенко, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник відділу теорії ядерного синтезу

Ухвалено на засіданні Вченої ради Інституту ядерних досліджень НАН України

протокол № 6 від “ 5 ” липня 2023 р.

Опис навчальної дисципліни
«Числові методи математичної фізики»

Галузь знань, напрям підготовки, спеціальність, освітньо-кваліфікаційний рівень	
Галузь знань	10 Природничі науки
Напрям підготовки	104 Фізика і астрономія
Освітньо-кваліфікаційний рівень	доктор філософії
Характеристика навчальної дисципліни	
Вид	Вибір аспіранта
Загальна кількість годин	120
Кількість кредитів ECTS	4
Кількість змістових модулів	2
Форма контролю	іспит
Показники навчальної дисципліни для денної форми навчання	
Рік підготовки	II
Лекційні заняття	32
Практичні, семінарські заняття	16
Лабораторні заняття	немає
Самостійна робота	70
Консультації	2

Вступ

Дисципліна «Числові методи математичної фізики» є частиною професійної підготовки аспірантів за вибором аспіранта за напрямом 10- Природничі науки, *спеціальністю – 104 фізика і астрономія,* що викладається протягом третього року навчання.

Метою викладання навчальної дисципліни є оволодіння необхідним мінімумом знань із числових методів математичної фізики, які дозволять правильно використовувати числові методи для розв'язання найпоширеніших задач і в разі потреби розшукати в літературі або сконструювати метод розв'язання нової задачі. Основними завданнями дисципліни **«Числові методи математичної фізики»** є (1) ознайомлення з найпоширенішими методами, що застосовуються для розв’язання функціональних рівнянь та знаходження екстремумів функцій та квадратур; (2) оволодіння методами розв’язання задачі Коші та крайових задач для звичайних диференціальних рівнянь; (3) вивчення теорії різницевих схем та методів розв’язання основних рівнянь математичної фізики – рівняння адвекції, рівняння дифузії, хвильового рівняння та рівняння Пуасона; (4) оволодіння методом скінченних елементів; (5) ознайомлення з головними підходами до розв’язання задач математичної фізики, некоректних за Адамаром (зокрема, інтегральних рівнянь).

Після вивчення курсу аспірант повинен ***знати***:

- Джерела похибок при числових розрахунках;
- Основи теорії апроксимації та стійкості різницевих схем для рівнянь з частинними похідними;
- Порівняльні характеристики методів розв’язання функціональних рівнянь;
- Найпростіші методи мінімізації функцій та їх порівняльні властивості;
- Основні методи числового обрахунку інтегралів та їх точність;
- Основні методи розв’язання задачі Коші та граничних задач для звичайних диференціальних рівнянь;
- Підходи до

У результаті вивчення дисципліни аспірант повинен ***вміти***:

- Обрахувати інтеграл;
- Розв’язати систему алгебраїчних рівнянь;
- Знайти екстремум функції;
- Розв’язати задачу Коші або граничну задачу для диференціального рівняння вибрати при цьому числову схему, оцінити похибку цієї схеми та реалістичність досягнення результату;
- Розв’язати задачу, некоректну за Адамаром (інтегральне рівняння).

Контроль знань аспіранта здійснюється за модульно-рейтинговою системою. Змістовий модуль 1 включає теми ????????, змістовий модуль 2 – теми ???????, змістовий модуль 3 – теми ????????????.

- **ЗМІСТ ТА СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. Базові методи.

ТЕМА1. Розв'язання рівнянь та оптимізація. **(*2 год.*)**

Методи розв'язання функціональних рівнянь (метод простої ітерації. метод бісекції, метод Ньютона, метод січних). Методи оптимізації (метод золотого перерізу, градієнтний метод, метод Ньютона, метод спряжених градієнтів).

ТЕМА 2. Інтегрування. **(2 *год.*)**

Обчислення квадратур (метод трапецій, метод прямокутників, метод Симпсона). Задача Коші для звичайних диференційних рівнянь (метод Ейлера, методи Рунґе-Кутти та Адамса). Приклад числової нестійкости.

ТЕМА 3. Крайові задачі для звичайних диференційних рівнянь. **(2 *год.*)**

Метод пристрілювання. Метод Томаса. Умови застосовности цих методів.

Модуль 2. Метод скінченних різниць для рівнянь з частинними похідними.

ТЕМА 4. Теоретичні основи методу скінченних різниць та застосування до рівняння дифузії. **(*6 год.*)**

Ідея сіткового методу апроксимації. Різницеві оператори та локальна апроксимація. Шеституочкові схеми для рівняння дифузії. Основи теорії операторів у лінійних векторних просторах. Глобальна апроксимація, стійкість та збіжність (принцип Лакса-Рихтмаєра). Теорія стійкості різницевих схем. Метод розділення змінних. Стійкість схем для рівняння дифузії.

ТЕМА 5. Гіперболічні рівняння. **(4 *год.*)**

Різницеві схеми для рівняння адвекції. Монотонність різницевої схеми. Числова дифузія. Хвильове рівняння: схема «хрест» та неявні схеми.

ТЕМА 6. Задачі зі змінними коефіцієнтами та нелінійні задачі. **(2 *год.*)**

Задачі зі змінними коефіцієнтами. Консервативність. Принцип заморожених коефіцієнтів. Задачі в криволінійних координатах. Нелінійні задачі.

ТЕМА 7. Задача Дирихле для рівняння Пуасона. **(2 *год.*)**

Різницева схема «хрест». Апроксимація крайових умов для непрямокутної області. Стійкість: мажоранта Ґершґорина.

ТЕМА 8. Методи розщеплення. **(*2 год.*)**

Метод релаксації для еліптичних задач. Енергетичний критерій стійкости Самарського. Змінно-трикутний метод. Метод змінних напрямків.

Модуль 3. Метод скінченних елементів та методи регуляризації.

ТЕМА 9. Проєкційні методи та метод скінченних елементів. **(*4 год.*)**

Метод Ритца. Метод скінченних елементів. Точність методу скінченних елементів. Скінченні елементи з підвищеною точністю. Метод Ґальоркіна. Метод скінченних елементів у еволюційних та багатовимірних задачах.

ТЕМА 10. Розв'язання задач, некоректних за Адамаром. **(*4 год.*)**

Приклади задач, некоректних за Адамаром. Обернене перетворення Абеля. Проблема шуму даних. Метод реґуляризації Тихонова. Метод синґулярного розкладення матриці. Підсумки курсу.

Структура навчальної дисципліни

Назва лекції			
	лекції	Практичні/ семінари	Самостійна робота
Змістовний модуль 1. Базові методи.			
Тема 1. Базові методи.	2	1	6
Тема 2. Інтегрування.	2	1	6
Тема 3. Крайові задачі для звичайних диференційних рівнянь.	2	2	10
Разом за змістовний модуль 1	**6**	**4**	**22**
Змістовний модуль 2. Метод скінченних різниць для рівнянь з частинними похідними.			
Тема 4. Теоретичні основи методу скінченних різниць та застосування до рівняння дифузії.	6	3	8

Тема 5. Гіперболічні рівняння.	4	4	8
Тема 6. Задачі зі змінними коефіцієнтами та нелінійні задачі.	2	1	4
Тема 7. Задача Дирихле для рівняння Пуасона.	2	1	4
Тема 8. Методи розщеплення.	2	1	4
Разом за змістовний модуль 2	**16**	**10**	**28**
Змістовний модуль 3. Метод скінченних елементів та методи регуляризації.			
Тема 9. Проєкційні методи та метод скінченних елементів.	6	1	8
Тема 10. Розв'язання задач, некоректних за Адамаром.	4	1	12
Разом за змістовний модуль 3	**10**	**2**	**20**
Всього	**32**	**16**	**70**

Загальний обсяг: 120 год., зокрема: лекцій – 32 год.; практичних/семінарів – 16 год., самостійної роботи – 70 год., консультацій – 2 год.

Тематичний план практичних та семінарських занять (16 год)

№	Назва теми	К-ть годин
1.	Підготовка до контрольної роботи: розв'язання задач із дослідження апроксимації та стійкости різницевих схем	4
2.	Контрольна робота	2
3.	Здача практичних завдань та консультації з методики їх розв'язання.	10

Самостійна робота

№	Назва	К-ть годин
1.	Виконання практичних завдань	30

2.	Підготовка до навчальних занять та контрольних робіт	40

Запитання для самоперевірки

1. Коли метод простої ітерації є збіжним?
2. Що таке лінійна, надлінійна, квадратична збіжність метода?
3. Коли є застосовними методи бісекції та хорд?
4. Коли є застосовними методи Ньютона та січних?
5. Які методи є придатними для розв'язання системи кількох рівнянь?
6. Яким методом мінімізують функцію одної змінної?
7. Від чого залежить швидкість збіжности методу градієнтного спуску? З якими задачами йому важко впоратись?
8. Як вибрати метод розв'язання для погано обумовленої задачі оптимізації?
9. Які ви знаєте методи обчислення квадратур і як можна схарактеризувати точність цих методів?
10. Які методи розв'язання задачі Коші для звичайних диференційних рівнянь ви знаєте?
11. Чи варте зусиль застосування методів високого порядку точности при розв'язанні звичайних диференційних рівнянь? Чому?
12. Які методи розв'язання крайових задач для звичайних диференційних рівнянь ви знаєте?
13. У якій ситуації метод пристрілювання може не спрацювати?
14. Для чого використовується метод Томаса?
15. Чи можете ви схарактеризувати матриці, для яких метод Томаса є стійким?
16. Що таке різницева схема?
17. Що таке шаблон різницевої схеми?
18. Що таке збіжність різницевої схеми?
19. Як теоретично довести, що різницева схема збіжна?
20. Як на практиці перевіряють точність отриманого розв'язку?
21. Що таке похибка апроксимації різницевої схеми?
22. У чому різниця між локальною та глобальною похибкою апроксимації? Чи пов'язані вони?
23. Як знаходять локальну похибку апроксимації?
24. Що таке стійкість різницевої схеми?
25. Що таке умовна стійкість та абсолютна стійкість?
26. Які методи дослідження стійкости для еволюційних задач вам знайомі?
27. Що таке умовна апроксимація?
28. Якими є апроксимація та стійкість найпростішої явної схеми для рівняння дифузії?
29. Якими є апроксимація та стійкість шеститочкових неявних схем для рівняння дифузії?

30. Як розв’язують сіткові рівняння, коли рівняння дифузії розв’язуєься неявними методами?
31. Що ви знаєте про альтернативні (тришарові тощо) різницеві схеми для розв’язання рівняння дифузії?
32. Що таке характеристики рівняння адвекції і як можна використати їх, щоб розв’язати рівняння чисельно?
33. Що таке умова Куранта-Фридрихса-Леві і яка можна його тлумачити фізично (або інформаційно)?
34. Які явні схеми для рівняння адвекції ви знаєте і як можна порівняти їх властивості (апроксимацію, стійкість)?
35. Які неявні схеми для рівняння адвекції ви знаєте?
36. Які різницеві методи ви б вибрали, якщо в вашому рівнянні адвекції швидкість середовища змінює напрямок? Сильно змінює величину?
37. Що таке монотонність різницевої схеми?
38. Що таке числова дифузія?
39. Схарактеризуйте стійкість та апроксимацію схеми «хрест» для хвильового рівняння.
40. Які схеми для хвильового рівняння є абсолютно стійкими?
41. Що таке консервативність різницевої схеми? Чому вона є важливою?
42. Як розв’язують квазилінійні еволюційні задачі математичної фізики?
43. Яка різницева схема найчастіше застосовується для рівняння Пуасона?
44. Як можна апроксимувати крайову умову задачі Дирихле в області з криволінійною границею?
45. Чи можете ви стисло сформулювати ідею доведення стійкости схеми «хрест» для задачі Дирихле?
46. Як можна розв’язати систему рівнянь, яка виникає після апроксимації задачі Дирихле?
47. У чому полягає ідея змінно-трикутного методу?
48. Якими є умови стійкости змінно-трикутного методу?
49. У чому полягає ідея методу змінних напрямків?
50. Якими є умови стійкости методу змінних напрямків?
51. Порівняйте між собою змінно-трикутний метод та метод змінних напрямків.
52. Що таке проєкційні методи розв’язання задач математичної фізики?
53. Чим відрізняються методи Рітца та Ґальоркіна?
54. Що таке метод скінченних елементів у його сучасному математичному тлумаченні?
55. Чим відрізняються підходи до оцінки точности розв’язку в методі скінченних різниць та в методі скінченних елементів?
56. Що таке природні та головні крайові умови? Як їх розрізняти? Чому це розрізнення є важливим?
57. Що таке базисні сплайни та як вони використовуються при побудові числових схем?
58. Що треба брати до уваги, вибираючи скінченні елементи для задачі математичної фізики?

59. Як метод скінченних елементів використовується в еволюційних задачах?
60. Як будуються скінченні елементи в багатовимірних задачах?
61. Що таке коректність задачі математичної фізики за Адамаром?
62. Які приклади практично важливих задач, некоректних за Адамаром, ви знаєте?
63. У чому полягає головна ідея, яка дозволяє розв'язувати задачі, некоректні за Адамаром?
64. У чому полягає метод регуляризації Тихонова?
65. Що таке синґулярне розкладення матриці?
66. Як синґулярне розкладення матриці використовується для придушення шуму при розв'язанні некоректних задач?
67. Як на практиці контролюють точність при розв'язанні некоректних задач математичної фізики?

Запитання до заліку

1. Методи розв'язання систем нелінійних рівнянь.
2. Методи оптимізації.
3. Методи обчислення квадратур.
4. Методи Ейлера та Рунґе-Кутти.
5. Методи Адамса.
6. Розв'язання крайових задач.
7. Ідея сіткового методу апроксимації. Різницеві оператори та локальна апроксимація.
8. Стійкість різницевої схеми за початковими даними та за правою частиною. Метод розділення змінних. Енергетичний критерій Самарського.
9. Принцип Лакса-Рихтмаєра.
10. Різницеві схеми для рівняння дифузії.
11. Різницеві схеми для рівняння адвекції. Критерій Куранта-Фридрихса-Леві.
12. Монотонність різницевої схеми. Числова дифузія.
13. Різницеві схеми для хвильового рівняння.
14. Різницеві схеми для рівнянь з частинними похідними зі змінними коефіцієнтами. Консервативність. Принцип заморожених коефіцієнтів.
15. Різницеві схеми для нелінійних рівнянь з частинними похідними.
16. Задача Дирихле для рівняння Пуасона.
17. Схеми розщеплення та розв'язання багатовимірних задач.
18. Метод Ритца та метод скінченних елементів (на прикладі одновимірної крайової задачі).
19. Точність методу скінченних елементів. Скінченні елементи з підвищеною точністю.
20. Метод скінченних елементів у багатовимірних задачах.
21. Метод Ґальоркіна та метод скінченних елементів у еволюційних та інших несамоспряжених задачах.

22. Найважливіші задач математичної фізики, некоректні за Адамаром.
23. Метод реґуляризації Тихонова та його практична реалізація.
24. Метод синґулярного розкладення матриці для задач, некоректних за Адамаром.

Форма контролю знань аспіранта

Основною формою поточного контролю знань є проведення модульних контрольних робіт. За результатами 3-х модульних контрольних робіт виводиться основна оцінка, яка переводиться у рейтингові бали (0-20 балів за модульну контрольну роботу). До них додаються бали за результатами складання заліку (0-40 балів).

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою для заліку
90–100 82–89 74–81 64–73 60–63	A B C D E	зараховано
35–59	FX	не зараховано з можливістю повторного складання
0–34	F	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

Література

[1] Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. — М.: Наука, 1987.
[2] Калиткин Н.Н. Численные методы. — М.: Наука, 1978.
[3] Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1983.
[4] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1977.
[5] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1986.
[6] Shen S.-Y. A Numerical Study of Inverse Heat Conduction Problems. — Computers and Mathematics with Applications, vol. 38, pp. 133-138, 1999.
[7] Richtmyer R.D., Morton K.W. Difference Methods for Initial Value Problems. — New York: Interscience Publishers, 1967; Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. — М.: Мир, 1972.
[8] Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы (введение в теорию). — М.: Наука, 1977.
[9] Potter D. Computational Physics. — New York: John Wiley & Sons, 1973; Поттер Д. Вычислительные методы в физике. — М.: Мир, 1975.

[10] Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. — М.: Наука, 1967.
[11] Преображенский Н.Г., Пикалов В.В. Неустойчивые задачи диагностики плазмы. – Новосибирск: Наука, 1982.
[12] Hairer E., Nørsett S.P., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I (Nonstiff Problems). — Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 1993; Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г., Решение обыкновенных дифференциальных уравнений (нежесткие задачи). — М.: Мир, 1990.
[13] Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач. — Новосибирск: Наука, 1967.