

# ОСНОВЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ

---

*Лектор – Усов Эдуард Викторович*

## **Программа курса лекций**

(7-й семестр, лекции 32 ч., семинары 34 ч., диф.зач.)

1. Двоичная арифметика, представление чисел с плавающей точкой, точность вычислений.
2. Решение уравнений  $f(x) = 0$ . Методы деления пополам, простых итераций, Ньютона, Мюллера, Стефенсона. Скорость сходимости. Многомерный метод Ньютона. Вычисление нулей комплексных функций.
3. Вычисление интегралов. Методы прямоугольников, трапеций. Формула Симпсона. Метод Гаусса. Оценка ошибки для этих методов. Несобственные интегралы.
4. Интерполяция и аппроксимация. Интерполяционный полином в форме Лагранжа и Ньютона. Точность интерполяции. Первые и вторые производные функции, заданной на сетке. Интерполяция кубическими сплайнами.
5. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод Эйлера. Критерий устойчивости. Методы Рунге-Кутты 2-го и 4-го порядков точности. Многошаговые методы. Экспоненциальные интеграторы. Жесткие системы уравнений.
6. Метод Гаусса решения систем линейных алгебраических уравнений. QR и LU разложения. Разложение Холецкого. Трехдиагональные матрицы. Прогонка. Представление о численных методах решения задачи на собственные значения. Степенной метод. Обратные итерации. Метод вращений Якоби. QR-алгоритм.
7. Решение задачи Коши для одномерного уравнения диффузии на отрезке. Аппроксимация граничных условий Дирихле и Неймана. Схемы явные, неявные и Кранка-Николсон. Точность аппроксимации. Критерий устойчивости. Компактные схемы повышенного порядка.
8. Задача Коши для многомерного уравнения диффузии. Схемы явные и неявные. Схема расщепления. Локально одномерный метод.
9. Дискретное преобразование Фурье. Элайзинг, эффект частотола, Окно Ханна. Алгоритм быстрого преобразования Фурье. Пакет программ FFTW. Неравномерное дискретное преобразование Фурье.
10. Задача Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера. Схема расщепления по физическим факторам, порядок аппроксимации и устойчивость.

11. Метод установления для уравнения Пуассона. Решение нелинейных операторных уравнений  $\hat{L}\varphi = 0$ . Методы стрельбы, Ньютона-Рафсона-Канторовича. Метод инвариантного погружения.
12. Численное решение уравнения переноса. Критерий устойчивости Куранта. Уравнение Хопфа.
13. Метод Бубнова-Галёркина. Метод конечных элементов.

## Литература

- [1] **Смирнов С. В.** Основы вычислительной физики. Часть I. Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2015.
- [2] **Смирнов С. В.** Основы вычислительной физики. Часть II. Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2017.
- [3] **Калиткин Н. Н.** Численные методы. М:Наука, 1978.
- [4] **Дьяченко В.Ф.** Основные понятия вычислительной математики. М: Наука, 1972.
- [5] **Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К.** Машинные методы математических вычислений. М:Мир, 1980.
- [6] **Каханер Д., Моулер К., Нэш С.** Численные методы и программное обеспечение. М:Мир, 1998.
- [7] **Хакимзянов Г. С., Черный С. Г.** Методы вычислений: В 4 ч.: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2008. – Часть 3.
- [8] **Шарый С. П.** Курс Вычислительных методов. 2020.

## Темы семинаров

Семинары проходят в терминальном классе. Их цель — выработка практических навыков по написанию простых программ, реализующих численные методы, их отладке до работоспособного состояния, верификации результатов.

1. Представление чисел с плавающей точкой.
2. Итерационные методы решения уравнений.
3. Интегрирование функций.
4. Полиномиальная интерполяция.
5. Решение ОДУ.
6. Степенной метод вычисления максимального собственного значения.
7. Задача Коши для одномерного уравнения диффузии.
8. Дискретное преобразование Фурье синусоиды. Окно Ханна.
9. Вычисление свертки через преобразование Фурье.

## Памятка по написанию программ

Требования к программам:

1. Необходима проверка результатов работы программы на разумность, предельные случаи, согласие с аналитическими решениями там, где они могут быть получены. Ценность программы, которая компилируется и «что-то» считает, близка к нулю.

2. Все константы, соответствующие физическим величинам и расчётным параметрам, должны быть объявлены в виде отдельных переменных (в т.ч. со спецификатором `const`) либо с помощью директивы препроцессора `#define` :

```
//Под MSVC используйте #define _USE_MATH_DEFINES перед подключением math.h!  
printf("BAD WAY:      Circle length of radius R=%f is %f\n", r, 3.141593*r);  
printf("PLEASE DO SO: Circle length of radius R=%f is %f\n", r, M_PI*r);
```

Рекомендации:

1. Ставьте точки при целочисленных константах, используемых при вычислениях величин с плавающей точкой:

```
const double x = 2/3;    //x будет равен нулю!  
const double y = 2./3.; //y будет равен двум третям
```

2. Минимизируйте повторяющийся программный код, выносите его в отдельные функции, тестируйте их работу и затем используйте повторно. Помните: грамотно спроектированную и разбитую на логические блоки программу отлаживать значительно легче.
3. Перед тем как писать программу, подумайте, есть ли в ней логические блоки, которые могут быть полезны вам в будущем при решении других задач (напр., интегрирование сеточных функций, интерполяция, построение графиков)? Если да, то вынесите их в отдельные функции, не использующие глобальных переменных программы. Этим вы сэкономите своё время и силы на написание и отладку следующих программ.
4. Используйте форматирование кода для улучшения его читаемости

```
http://ru.wikipedia.org/wiki/Стандарт\_оформления\_кода  
http://ru.wikipedia.org/wiki/Спагетти-код
```

5. Используйте графики для анализа полученных результатов. Как правило, графическая информация воспринимается человеком гораздо легче и быстрее чисел.
6. Если программа работает неправильно, и ошибку не удаётся найти внимательным чтением исходного кода, добавьте в программу вывод отладочной информации (значений переменных, значений в узлах сетки, нормы сеточных функций и т.п.) с помощью `printf` или `fprintf`, либо используйте отладчик, проверяя «вручную» результаты промежуточных вычислений.

## Задачи для семинаров

### Задача 1

*Машинным*  $\varepsilon$  называется такое число, что  $1 + \varepsilon/2 = 1$ , но  $1 + \varepsilon \neq 1$ . (Также часто используется обозначение ULP – *unit in the last place*, или *unit of least precision*, единица в младшем разряде.) Найти машинное  $\varepsilon$ , число разрядов в мантиссе, максимальную и минимальную степени, при вычислениях с обычной и двойной точностью. Сравнить друг с другом четыре числа:  $1$ ,  $1 + \frac{\varepsilon}{2}$ ,  $1 + \varepsilon$  и  $1 + \varepsilon + \frac{\varepsilon}{2}$ , объяснить результат.

### Задача 2

Используя методы дихотомии, простых итераций и Ньютона, найти уровень энергии  $E$  основного состояния квантовой частицы в прямоугольной потенциальной яме

$$-\frac{1}{2}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| \leq a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

### Задача 3

Вычислить интегралы

$$I_{3a} = \int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2}, \quad I_{3b} = \int_0^1 x^{\frac{1}{3}} e^{\sin x} dx$$

методами трапеций и Симпсона, разделив отрезок интегрирования на 4, 8, 16, ... интервалов. Как убывает погрешность численного интегрирования с ростом числа интервалов?

### Задача 4

Используя интегральное представление для функций Бесселя целого индекса  $m$

$$J_m(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(mt - x \sin t) dt$$

и вычисляя производную с помощью конечной разности в тех же точках, что и сам интеграл, продемонстрировать выполнение равенства

$$J'_0(x) + J_1(x) = 0$$

с точностью не хуже  $10^{-10}$  на отрезке  $x \in [0, 2\pi]$ . Для вычисления интегралов использовать метод трапеций и метод Симпсона. Продемонстрировать теоретический порядок точности реализованных методов на последовательности сгущающихся сеток на простых примерах.

### Задача 5

Провести интерполяционный полином  $P_n(x)$  через точки

$$x_k = -5 + k \frac{10}{n}, \quad y_k = \frac{1}{1 + x_k^2}, \quad k = 0, \dots, n.$$

при  $n = 4, \dots, 15$ . Нарисовать графики  $P_n(x) - \frac{1}{1+x_k^2}$ . Объяснить результат.

### Задача 6

Решить задачу Коши

$$\frac{dx}{dt} = -x, \quad x(0) = 1, \quad 0 < t < 3$$

методом Эйлера первого порядка точности и методами Рунге-Кутты второго и четвертого порядка точности.

### Задача 7

Решить систему уравнений хищник-жертва

$$\begin{cases} \dot{x} = a x - b x y \\ \dot{y} = c x y - d y \end{cases}$$

методом Рунге-Кутты второго порядка точности при  $a = 10, \quad b = 2, \quad c = 2, \quad d = 10$ . Нарисовать фазовую траекторию.

### Задача 8

Решить жесткую систему уравнений

$$\begin{cases} u' = 998 u + 1998 v \\ v' = -999 u - 1999 v \end{cases}$$

Варианты схем (явная и неявная):

1.

$$\begin{aligned} y^{n+1} &= y^n + h \cdot f(x^n, y^n) \\ y^{n+1} &= y^n + \frac{h}{2} f(x^n, y^n) + \frac{h}{2} f(x^{n+1}, y^{n+1}) \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} y^{n+3} &= y^{n+2} + \frac{h}{12} (23f(x^{n+2}, y^{n+2}) - 16f(x^{n+1}, y^{n+1}) + 5f(x^n, y^n)) \\ y^{n+2} &= y^{n+1} + \frac{h}{12} (5f(x^{n+2}, y^{n+2}) + 8f(x^{n+1}, y^{n+1}) - f(x^n, y^n)) \end{aligned}$$

3.

$$\begin{aligned} y^{n+4} &= y^{n+3} + \frac{h}{24} (55f(x^{n+3}, y^{n+3}) - 59f(x^{n+2}, y^{n+2}) + 37f(x^{n+1}, y^{n+1}) - 9f(x^n, y^n)) \\ y^{n+3} &= y^{n+2} + \frac{h}{24} (9f(x^{n+3}, y^{n+3}) + 19f(x^{n+2}, y^{n+2}) - 5f(x^{n+1}, y^{n+1}) + f(x^n, y^n)) \end{aligned}$$

### Задача 9

Методом прогонки решить разностный аналог граничной задачи для уравнения  $y'' = \cos x$  на промежутке  $-\pi/2 < x < \pi/2$ . Рассмотреть различные варианты граничных условий (на функцию и ее производную).

### Задача 10

Решить задачу Коши для одномерного уравнения теплопроводности по схеме Кранка-Николсон

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad L = 1$$
$$u(0, t) = 0, u(L, t) = 0, \quad u(x, 0) = x(1 - x/L)^2,$$

На каждом шаге по времени найти максимальное значение температуры и нарисовать зависимость максимальной температуры от времени. Показать, что на больших временах она убывает экспоненциально. Исследовать сходимость схемы Кранка-Николсон.

### Задача 11

Найти уровень энергии и волновую функцию  $\psi(x)$  основного состояния в потенциальной яме  $U(x)$ , решая конечномерный аналог спектральной задачи для одномерного стационарного уравнения Шрёдингера

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) - E \right) \psi(x, t) = 0, \quad |\psi(x)| \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad |x| \rightarrow \infty.$$

Для поиска наименьшего собственного значения  $\hat{H}\vec{\psi} = E_0\vec{\psi}$  трёхдиагональной матрицы  $\hat{H}$  использовать метод обратных итераций. Проверить работу программы, сравнив с точным решением для  $U(x) = \frac{1}{2}x^2$ .

### Задача 12

Сигнал, состоящий из двух гармонических осцилляций с различными частотами и амплитудами,  $f(t) = a_0 \sin \omega_0 t + a_1 \sin \omega_1 t$  регистрируется на некотором интервале  $T$ . Вычислить и построить график спектра мощности. Сравнить спектры, полученные с прямоугольным окном и окном Ханна, при следующих параметрах:  $a_0 = 1$ ,  $a_1 = 0.002$ ,  $\omega_0 = 5.1$ ,  $\omega_1 = 5\omega_0 = 25.5$ ,  $T = 2\pi$ .

## Варианты курсовых работ

По согласованию с преподавателем в терминальном классе студент может самостоятельно выбрать тему курсовой работы. Студентам, которые не согласуют тему работы до начала декабря, будет предложена одна из задач из списка ниже либо аналогичная по уровню сложности задача по выбору преподавателя.

### Вариант 1

Решить задачу Коши для одномерного уравнения диффузии по схеме Кранка-Николсон

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x), \quad 0 < x < L, \quad L = 1$$
$$u(0, t) = 0, u(L, t) = 0, u(x, 0) = 0, f(x) = x(1 - x/L)^2.$$

На каждом шаге по времени найти максимальное значение температуры и положение максимума, построить график зависимости указанных величин от времени. Модифицировать программу, заменив граничное условие в точке  $L$  на условие теплоизоляции  $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$  и построить аналогичные графики. Что будет, если обе границы теплоизолированы?

### Вариант 2

Решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по явной схеме. Производную по координате заменить на разностное отношение и полученную систему ОДУ по времени решить методом Рунге-Кутты второго порядка точности

$$i \frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10$$

$$A(-L, t) = A(L, t) = 0, \quad A(x, 0) = c\lambda / \cosh(\lambda x)$$

При любом  $\lambda$  и  $c = 1$   $|A|$  не должен зависеть от времени. При  $\lambda = 1$  попробуйте поменять  $c$ . Нарисовать поверхность  $|A(x, t)|$ .

### Вариант 3

Используя пакет FFTW, решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по схеме расщепления

$$i \frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10$$

$$A(-L, t) = A(L, t), \quad A(x, 0) = c\lambda / \cosh(\lambda x)$$

При любом  $\lambda$  и  $c = 1$   $|A|$  не должен зависеть от времени. При  $\lambda = 2$  попробуйте поменять  $c$ . Нарисовать поверхность  $|A(x, t)|$ .

### Вариант 4

Решая задачу Коши

$$\frac{\partial u}{\partial t} = g \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1,$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad u(x, 0) = f(x) = x(1 - x)$$

по неявной схеме, найти максимальное собственное значение оператора  $\hat{L} = g \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  при  $g = 0.5$  и  $g = 1$ . Как зависит ответ от выбора  $f(x)$ ?

### Вариант 5

Используя метод установления и локально одномерный метод, найти стационарное распределение температуры в двумерной квадратной области в задаче с источником тепла

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x, y)$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1.$$

Интенсивность источника  $f(x, y) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2)$ . Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что она перестала меняться и нарисовать двумерное распределение температуры.

### Вариант 6

Используя метод установления и локально одномерный метод, найти стационарное распределение температуры в двумерной квадратной области в задаче с ненулевой температурой на границе:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2},$$

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = (1 - y^2/L^2), \quad u(x, -L, t) = u(x, L, t) = (1 - x^2/L^2), \quad L = 1.$$

Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что она перестала меняться в процессе установления решения и нарисовать двумерное распределение температуры.

### Вариант 7

Используя локально одномерный метод, решить задачу Коши для уравнения теплопроводности в двумерной квадратной области

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1,$$

а начальное распределение температуры  $u(x, y, 0) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2)$ . Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата. Убедиться, что закон спада на больших временах имеет экспоненциальный характер. Определить показатель экспоненты.

### Вариант 8

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с источником тепла и анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x, y, t)$$

при условии, что температура на границах квадрата равна нулю

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1.$$

Интенсивность источника

$$f(x, y) = (1 - x^2/L^2)(1 - y^2/L^2) + (y/L + 1)(1 - y^2/L^2) \sin(\omega t), \quad \omega = 2\pi.$$

Вычислить и нарисовать зависимость от времени температуры в центре квадрата.

### Вариант 9



Решить задачу Коши для нелинейного уравнения Шрёдингера по схеме расщепления

$$i \frac{\partial A}{\partial t} = 2|A|^2 A + \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad -L < x < L, \quad L = 10,$$

$$A(-L, t) = A(L, t), \quad A(x, 0) = c\lambda / \cosh(\lambda x).$$

При любом  $\lambda$  и  $c = 1$  решение  $|A(x, t)|$  не должно зависеть от времени. Исследовать численное решение при  $\lambda = 2$  для различных  $c$ . Нарисовать поверхность  $|A(x, t)|$ . Фурье-образ вычислять с помощью пакета FFTW.

#### Вариант 10

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = \sin 2\pi t, \quad u(x, -L, t) = u(x, L, t) = 0, \quad L = 1.$$

#### Вариант 11

Найти зависимость температуры от времени в центре двумерной квадратной области в задаче с анизотропной теплопроводностью

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 0.5 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

$$u(-L, y, t) = u(L, y, t) = \sin 2\pi t$$

Стенки  $u(x, -L, t)$  и  $u(x, L, t)$  теплоизолированы.  $L = 1$ .

#### Вариант 12

Найти уровень энергии и волновую функцию  $\psi(x)$  основного состояния в симметричной яме  $U(-x) = U(x)$ , интегрируя одномерное стационарное уравнение Шрёдингера

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) - E \right) \psi(x, t) = 0, \quad |\psi(x)| \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad x \rightarrow 0$$

по  $x$  от 0 до некоторого  $x_{max}$  для различных  $E$ . Интегрирование по  $x$  вести методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности. Проверить работу программы в нескольких частных случаях, для которых легко выписывается аналитическое решение спектральной задачи.

#### Вариант 13

Используя метод вращений Якоби для решения конечномерного аналога спектральной задачи для одномерного стационарного уравнения Шрёдингера, найти уровни энергии и волновые функции  $\psi_k(x)$  основного и первых 20 возбуждённых состояний гармонического осциллятора. Сравнивая численный ответ с точным решением, оценить погрешность ответа в зависимости от количества  $k$  нулей волновой функции  $\psi_k(x)$ .

Вариант 14

Решить задачу Коши для уравнения Хопфа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad -5 < x < 10,$$

$$u(x, 0) = \exp(-x^2/2), \quad 0 < t < t_{\max} = 1.$$

Вычислить максимальную невязку с точным решением. Сравнить результаты, полученные при использовании двух различных численных схем.

Вариант 15

Используя метод установления, найти стационарное распределение температуры в кольце, ограниченном двумя концентрическими окружностями с радиусами  $a$  и  $b$ , если температура на внутренней границе поддерживается равной  $f(\varphi)$ , а на внешней границе —  $g(\varphi)$ . Исследовать несколько частных случаев (в т.ч. с нетривиальной зависимостью от  $\varphi$ ), для которых легко выписать аналитическое решение.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}, \quad u(a, \varphi) = f(\varphi), \quad u(b, \varphi) = g(\varphi)$$

Вариант 16\*

Используя метод установления, найти стационарное распределение температуры в круге радиуса  $R$ , если температура на границе поддерживается равной  $T(\varphi)$ .

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}, \quad u(R, \varphi) = T(\varphi) = \sum_{m=-l}^{+l} T_m(\varphi) e^{im\varphi}.$$

*Указание.* Искать решение в виде

$$u(r, \varphi, t) = \sum_{m=-l}^{+l} u_m(r, t) e^{im\varphi},$$

выделить в  $u_m(r, t)$  асимптотики в нуле  $u_m(r, t) = r^m f_m(r, t)$ , получить и интегрировать уравнения на  $f_m(r, t)$ . Для разложения в ряд Фурье использовать пакет FFTW. Исследовать несколько частных случаев (в т.ч. с нетривиальной зависимостью от  $\varphi$ ), для которых легко выписать аналитическое решение.

Вариант 17\*

Решить задачу Коши для нестационарного одномерного уравнения Шрёдингера

$$\left( i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - U(x) \right) \psi(x, t) = 0$$

по явной схеме. Производную по координате заменить на разностное отношение и полученную систему ОДУ по времени проинтегрировать методом Рунге-Кутты

второго порядка точности. Построить решение  $\psi(x, t)$  и Фурье-образ скалярного произведения  $P(t) = \langle \psi(x, t) | \psi(x, 0) \rangle$ . Рассмотреть случай линейного осциллятора. В чём физический смысл  $|P(\omega)|^2$ ?

*Требования к программе:* предусмотреть возможность замены потенциала  $U(x)$  и начальных условий  $\psi(x, 0)$ . Фурье-образ вычислять с помощью пакета FFTW.

Программу составили к.ф.-м.н. доцент Александр Иванович Черных, к.ф.-м.н. доцент Сергей Валерьевич Смирнов, к.ф.-м.н. доцент Дмитрий Игоревич Качулин, к.ф.-м.н. старший преподаватель Игорь Сергеевич Чеховской.

## Правила аттестации студентов по курсу «ОСНОВЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ»

1. В течение семестра студент обязан сдать своему семинаристу в устной форме все 12 задач из задания. В исключительных случаях и только по согласованию с семинаристом допускается неполная сдача одной (максимум двух) задач из задания. Сверх того, для получения зачёта студент обязан выполнить требования пп. ?? и ??.
2. Написание работоспособного программного кода является необходимым, но недостаточным условием для сдачи задания. Задача считается сданной, только когда студент ответил на все вопросы семинариста. Типичный список рекомендуемых вопросов по *всем* задачам включает вопросы о достоинствах и недостатках используемых численных методов, наличии альтернативных подходов к решению задачи; вопросы на понимание области применимости используемых методов и наглядной демонстрации модификации параметров, которые делают программу неработоспособной.
3. Для получения зачёта студент обязан сдать своему семинаристу курсовую работу в устной форме до конца зачётной сессии.
4. До начала декабря студент может согласовать со своим семинаристом тему курсовой работы. При выборе темы могут использоваться вычислительные задачи, связанные с дипломной практикой, моделированием экспериментальных исследований в лаборатории, а также любые исследовательские задачи, представляющие интерес для студента. Решение задачи должно включать использование одного или нескольких численных методов, самостоятельно реализуемых студентом в программном коде. По желанию студента используемые для решения задачи численные методы могут выходить за рамки программы данного курса.
5. Студенты, не согласовавшие со своим семинаристом тему курсовой работы до 1 декабря, получают на первом либо втором занятии декабря одну из задач из списка вариантов курсовых работ в программе курса, либо аналогичную по уровню сложности задачу по выбору семинариста. Задача, предложенная студенту преподавателем, *должна* решаться с использованием одного или нескольких численных методов из программы курса лекций (в противном случае студент вправе требовать замены задачи).

6. Студент обязан сдать устный зачёт, проводимый в зачётную сессию. На зачёте студенту необходимо ответить своему семинаристу на два теоретических вопроса по программе курса. Выбор двух вопросов происходит случайным образом либо осуществляется семинаристом на своё усмотрение.
7. В процессе приёма задач в течение семестра, заполнении ведомостей контрольных недель и приёма курсовой работы в конце семестра семинарист выставляет оценки, отражающие уровень квалификации студента и его готовность к научно-исследовательской работе в области вычислительной физики. В частности, оценивается самостоятельность работы студента; критическое отношение к результатам, выдаваемым компьютерной программой, и навыки их верификации; знание и понимание используемых численных методов, их достоинств, недостатков и ограничений; умение оценивать точность получаемых численных результатов; способность реализации численных методов в простом, понятном и надёжном программном коде, обеспечивающем простоту изменения параметров.
8. Итоговая оценка за курс выставляется семинаристом как среднее из оценок за работу в течение семестра, сдачу курсовой работы и ответов на теоретические вопросы.
9. Конфликтные и спорные ситуации, возникающие между студентом и семинаристом в ходе работы в семестре, при получении зачёта и выставлении итоговой оценки, урегулирует лектор.