Утвърдил: ……..
(проф. дфзн Георги Райновски)
Декан

Приета на ФС №7/06.04.2021

СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ “СВ. КЛИМЕНТ ОХРИДСКИ”

Факултет: Физически

Ф	З	Ф	0	1	0	1	2	1	**Физика**
Ф	З	И	0	2	0	1	2	1	**Инженерна физика**
Ф	З	А	0	4	0	1	2	1	**АМГ**
Ф	З	М	0	5	0	1	2	1	**Медицинска физика**

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Дисциплина:

Н	0	9	1

Програмиране и изчислителна физика

Учебна заетост	**Форма**	**Хорариум**
Аудиторна заетост	Лекции	30
	Семинарни упражнения	15
	Практически упражнения	45
Обща аудиторна заетост		**90**
Извънаудиторна заетост	Самостоятелна подготовка за тестове и практически задачи	40
	Подготовка за изпити	60
	Извънаудиторна работа над компютърните програми	65
Обща извънаудиторна заетост		**165**
ОБЩА ЗАЕТОСТ		**255**
Кредити аудиторна заетост		**3**
Кредити извънаудиторна заетост		**5.5**
ОБЩО ЕКСТ		**8.5**

№	Формиране на оценката по дисциплината[1]	% от оценката
1.	Изпит	50
2.	Решаване на задачи по време на практическите упражнения	35
3.	Тестове (два броя)	15

Анотация на учебната дисциплина:

Същността на курса е прилагане на числени методи с използване на компютри за изучаване на физични проблеми. В курса се набляга на физичните проблеми и основно внимание се отделя на последователността: *физичен проблем – математично описание – числен метод - алгоритъм – програмна реализация – анализ на получените резултати.* Този подход е следван системно навсякъде в разработените теми.

Физичните проблеми разглеждани в курса засягат основни въпроси от интерес за студенти бакалаври и включват теми от: оптика, астрофизика, твърдо тяло, електрични вериги, механика, обработка на сигнали и други области на физиката.

Разгледани са следните числени методи:

- методи за сумиране на редове;
- методи за намиране на корен на едно нелинейно уравнение;
- интерполация и екстраполация на данни;
- методи за апроксимация на криви;
- методи за намиране на екстремум на функция на една променлива;
- методи за числено диференциране;
- методи за числено интегриране;
- методи за решаване на системи линейни уравнения;
- методи за намиране на обратната матрица и изчисляване на детерминанта;
- методи за намиране на собствени стойности и собствени вектори на симетрични матрици;
- разлагане на периодична функция в ред на Фурие;
- Фурие трансформация;
- дискретно и бързо Фурие преобразование.

Основните елементи на програмирането, които се разглеждат са:

- етапи от писане на една програма, машинен език, асемблер, езици от високо ниво, понятие за транслатор, компилатор и интерпретатор;
- основни елементи на една програма, символи и типове данни;
- вградени (вътрешни) функции;
- структури и оператори за управление: структура верига, структури за взимане на решение (структура от типа: if-then-else), структури за цикли от типа do и подобни;
- входно-изходни операции;
- масиви и работа с тях;
- подпрограми и работа с тях;

В процеса на прилагане на числените методи с компютри студентите на практика се учат да използват различните елементи и структури на езика. Лекциите, задачите и различни допълнителни материали са качени на WEB страницата на факултета

Предварителни изисквания:
Математика, изучавана в задължителните курсове по математичен анализ и линейна алгебра; физика в рамките на общите курсове по механика, молекулна физика и електричество и магнетизъм. Някои от тези курсове се четат паралелно с настоящия.

Очаквани резултати:
След завършване на курса студентите ще знаят и използват елементите на програмния език, посочени в анотацията. Успешно завършилите курса ще са в състояние да прилагат изброените в анотацията числени методи в работата си като физици за решаване на конкретни проблеми във физиката.

Учебно съдържание

№	Тема - лекции	часа
	Елементи от програмирането. Данни и алгоритми	
1	Езици за програмиране. Машинен език. Асемблер. Езици на високо ниво (алгоритмични езици). Обща структура на една програма на високо ниво (Фортран). Етапи на писане и изпълнение на програмата. Паралелни пресмятания/изчисления. Паралелни високо производителни изчислителни системи.	1
2	Представяне числата в изчислителните машини. Основни типове данни използвани при програмиране. Аритметика с цели и аритметика с реални числа. Алгоритми.	1
3.	Основни елементи на една програма, символи и типове данни. Вградени (вътрешни) функции	1
4.	Структури за взимане на решение (структура от типа: if-then-else), структури за цикли от типа do и подобни	1
5	Подпрограми и работа с тях	1
6	Масиви и работа с тях	1
7	Входно-изходни операции. Четене на данни от файл и запис на данни във файл	1
	Интерполация и екстраполация. Апроксимация на криви и пресмятане на функции	
8	Интерполационна формула на Лагранж. Интерполиране със сплайн функции. Интерполация с рационални функции.	2
9	Методи за пресмятане на функции. Примери	1
	Числено сумиране на редове, диференциране, интегриране	
10	Константа на Маделунг – демонстриране на грешки от прекъсване и грешки от закръгляне. Разпространение на грешки. Демонстриране на важността на алгоритъма за бързината и точността на пресмятанията.	2
11	Методи за числено диференциране. Пресмятане на движението на махало при големи отклонения от равновесното положение. Елиптични интеграли. Методи на правоъгълниците, на трапеците и на Симпсън за пресмятане	3

	на интеграли. Контрол на грешката и адаптивна стъпка. Гаусови квадратури. Монте Карло метод за числено пресмятане на интеграли.	
	Екстремуми и нули на нелинейни уравнения	
12	Реликтово лъчение. Методи за намиране на корени на нелинейни уравнения – методи на разполовяването, на хордите и на Нютон.	2
13	Метод на златното сечение за намиране на екстремум.	1
	Числени методи на линейната алгебра	
14	Линейни електрични вериги. Решаване на системи линейни уравнения по метода на Гаус. Решаване на линейни системи чрез факторизация на матрицата. LU метод. Итерационен метод на Гаус-Зайдел.	4
15	Метод на Якоби за намиране на собствени стойности и собствени вектори на матрица. Намиране на собствените стойности на тридиагонални матрици.	2
	Фурие анализ	
16	Апроксимация на периодични сигнали с ред на Фурие. Фурие преобразование. Пример за Фурие преобразование: влияние на измервателния уред върху измервания сигнал. Конволюция. Възстановяване на входния (измервания) сигнал: деконволюция.	2
17	Корелация. Използване на корелацията за обработка на експериментални данни	2
18	Честотен спектър на непрекъснат сигнал. Дискретно Фурие преобразование. Честота на Найквист. Изглаждане (филтриране) на експериментални данни с дискретно Фурие преобразование. Бързо Фурие преобразование	2
	Тема – семинарни упражнения	
1	Обща структура на една програма, написана на език от високо ниво. Интегрирана среда за програмиране. Компилиране и създаване на изпълним код.	1
2	Представяне на числата в компютрите. Бит, байт, дума. Двоична и шестнадесетична система.	1
3	Прости типове данни и операции над тях – цели, реални, логически, символни. Оператор за присвояване.	1
4	Ред на пресмятане на изразите. Вътрешни (internal) функции: абсолютна стойност, тригонометрични, логаритъм и други	1
5	Логически изрази. Логически оператори.	1
6	Оператори за цикли.	1
7	Архитектура на сложна програма. Подпрограми. Място на подпрограмите спрямо главната подпрограма и обръщение на главната програма към подпрограми.	2
8	Масиви от данни.	1
9	Входно-изходни операции. Текстов файл. Запис и четене от текстов файл.	1
10	Анализ и алгоритмизиране на задачи от лабораторните упражнения. Времето на тези занятия се избира така, че да	5

	съвпада с нови теми и основни програми за различни числени методи.	
	Тема – лабораторни упражнения (правене на компютърни програми)	
1.	Пресмятане на машинния епсилон за данни от тип Real. Демонстриране на загуба на порядък при сумиране на числа.	3
2.	Числено пресмятане на функции	3
3.	Пресмятане на константата на Маделунг: директно и по метода на Евалд. Изчисляване на грешката от прекъсване.	3
4.	Намиране на температурата на реликтовото лъчение по метода на разполовяването и по метода на златното сечение. Сравняване на точност и бързодействие.	6
5.	Пресмятане на движението на махало при големи отклонения от равновесното положение. Числено решаване на елиптични интеграли. Сравняване на грешки в зависимост от метода и стъпката. Използване на готови подпрограми	6
6.	Решаване на система линейни уравнения по метода на Гаус. Прав и обратен ход. Избор на главен елемент. Използване на готови подпрограми.	6
7.	Разлагане на стъпковата функция в ред на Фурие. Визуализация и анализ на резултатите при различен брой членове на реда и дискутиране на феномена на Гибс.	6
8.	Използване на автокорелацията за изглаждане на експериментални данни. Визуализация на резултатите и обсъждане на степента на изглаждане в зависимост от броя данни, над които се извършва автокорелация.	6
9	Анализ на спектъра на непрекъснати сигнали с бързо Фурие преобразование, използвайки готови подпрограми.	6

Конспект за изпит

N	Въпрос
1.	Езици на високо ниво. Етапи на реализиране на програма писана на език на високо ниво. Обща структура на една програма.
2.	Основни типове данни и начин на съхранението им в паметта на компютъра. Аритметика с цели и аритметика с реални числа. Ред на пресмятане на изразите. Грешка от закръгляне и машинен епсилон.
3.	Логически изрази, логически отношения и логически оператори. Структура за разклонение от типа if-then-else.
4.	Цикли и оператори за цикли.
5.	Масиви и работа с тях.
6.	Модулен принцип за създаване на една програма. Подпрограми процедури: структура и взаимодействие с главната програма.
7.	Подпрограми функции: структура и взаимодействие с главната програма. Предаване на подпрограми като аргументи на други подпрограми.
8.	Входно-изходни операции. Четене на данни от файл и запис на данни във файл.

9.	Енергия на връзката на йонни кристали. Константа на Маделунг. Метод на Евжен за пресмятане на константата на Маделунг. Грешки от прекъсване.
10.	Реликтово лъчене. Числено решаване на нелинейни уравнения – постановка на задачата. Метод на разполовяването.
11.	Метод на секущите и метод на Нютон за намиране на корен на нелинейно уравнение.
12.	Метод на златното сечение за намиране на минимум.
13.	Числено диференциране. Формули за първа и втора производна.
14.	Пресмятане на движението на махало при големи отклонения от равновесното положение. Елиптични интеграли. Елементарни алгоритми за числено интегриране: метод на трапеците и метод на правоъгълниците.
15.	Формули на Симпсън и Нютон – Коутс за числено интегриране. Адаптивни процедури.
16.	Гаусови квадратури.
17.	Монте Карло метод за решаване на интеграли.
18.	Задачи на числените методи на линейната алгебра – общ преглед. Метод на Гаус за решаване на системи линейни уравнения. Частичен и пълен избор на главен елемент.
19.	Геометрична интерпретация и матрична формулировка на задачата за система от линейни уравнения. Число на обусловеност и лошо обусловени матрици.
20.	Метод на Гаус – Жордан. Метод на разлагане на горна и долна матрица.
21.	Намиране на собствените стойности на тридиагонални матрици.
22.	Ред на Фурие. Условия за развитието на една функция в ред на Фурие. Фурие преобразование.
23.	Свойства на преобразованието на Фурие. Конволюция. Използване на свойствата на конволюцията за намиране на входния сигнал.
24.	Корелация. Примери за използване на корелацията. Използване на автокорелацията за възстановяване на сигнал на фона на силен шум.
25.	Дискретно Фурие преобразование. Формула на Найквист. Бързо Фурие преобразование.

Библиография

Основна литература:

1. Лекциите към курса, качени на сайта: http://elearning-phys.uni-sofia.bg/~tvel/
2. Лекции по Програмиране и изчислителна физика на проф. Стоян Русев
3. Лекции по Програмиране и изчислителна физика на доц. Ивайло Христосков
4. S. Koonin D. Meredith, Computational physics (CRC Press 2018)
5. Б. Сендов, В. Попов *Числени методи*, Наука и изкуство (София 1996)
6. Дж. Форсайт, М. Малкълм, К. Молър *Компютърни методи за математически пресмятания*, Наука и изкуство (София 1986)
7. N. Giordano *Computational Physics*, Prentice Hall (New Jersey 1997)
8. W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, W. Vetterling Numerical Recipes*: The art of Scientific Computing*, Cambridge University Press (Cambridge, 1989)
9. R. Landau, M. Paez, C. Bordeianu Computational Physics, Wiley 2007

10. P. De Vries, *A first course in computational physics* John Wiley & Sons (New York 1993)
11. Всеки стандартен учебник по съответния програмен език

Допълнителна литература:

1. P. MacKeown, D. Newman *Computational Techniques in Physics*, Adam Hilger (Bristol 1987)
2. F. Vesely *Computational Physics*, Plenum Press (New York 1994)
3. J. Thijssen, *Computational Physics* Cambridge University Press (Cambridge 1999)
4. P. Harisson, *Computational methods in Physics, Chemistry and Biology*, John Wiley & Sons (Chichester 2001)
5. А. Ралстон *Начален курс по числени методи*, Наука и изкуство, (София, 1972)
6. R. Hamming, Numerical methods for Scientists and Engineers, (Dover Publications 1962)

Дата: 10. 02. 2021 г.

Съставили: Tzvetan Velinov Digitally signed by Tzvetan Velinov Date: 2022.09.14 10:00:38 +03'00'

/доц. дфзн Ц. Велинов/

/доц. д-р П. Петков/

/Гл. ас. д-р Галина Ванкова-Кирилова/