

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Механико-математический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан



Л. В. Гензе

« 30 » 08 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Решение многомерных задач математической физики

по направлению подготовки

01.04.03 Механика и математическое моделирование

Направленность (профиль) подготовки :

Механика жидкости, газа и нефтегазотранспортных систем

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.3.ДВ.03.01

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП



А.М. Бубенчиков

Председатель УМК



Е.А. Тарасов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен самостоятельно решать исследовательские задачи в рамках реализации научного (научно-технического, инновационного) проекта.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК 1.1 Проводит исследования, направленные на решение отдельных исследовательских задач

ИПК 1.2 Определяет способы практического использования научных (научно-технических) результатов

ИПК 1.3 Осуществляет наставничество в процессе проведения исследований

2. Задачи освоения дисциплины

– Навыки разработки и применения в исследованиях физических, математических и численных моделей в современной математической физике при решении отдельных многомерных задач.

– Знакомство и освоение актуальных прикладных задач в области современной математической физики, способов использования результатов исследований в данной тематике.

– Способность передать основные концепции современной математической физики менее опытным коллегам.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: математический анализ, дифференциальные уравнения, теоретическая механика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 з.е., 216 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-практические занятия: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Блок1:

Тема 1. Модели проницаемости систем из нанопластин.

Тема 2. Потенциалы взаимодействий. Континуальная модель проницаемости наносетчатой структуры.

- Тема 3. Модели взаимодействия нанотрубок со свободными молекулами/атомами.
- Тема 4. Модели взаимодействия фуллерита со свободными молекулами/атомами.
- Тема 5. Модель динамики фуллеренов.
- Тема 6. Модели вращения нанотрубки.
- Тема 7. Модель вращения наноторов.
- Тема 8. Модель вращения фуллеренов в абсолютном базисе.

Блок2:

- Тема 1. Разделение газов и разделение изотопов одного вещества.
- Тема 2. Одноатомные мембраны.
- Тема 3. Уравнение Шредингера.
- Тема 4. Квантовое просеивание.
- Тема 5. Обзор современной литературы по разделению газов и изотопов.

Блок3:

- Тема 1. Сеточные методы численного моделирования. Метод решёточных уравнений Больцмана.
- Тема 2. Математические основы метода решёточных уравнений Больцмана.
- Тема 3. Кинетические уравнения Больцмана.
- Тема 4. Дискретизация по времени и пространству кинетических уравнений Больцмана. Связь макроскопических параметров с функциями распределения.
- Тема 5. Типы решёток. Начальные и граничные условия.
- Тема 6. Обезразмеривание уравнений. Выбор параметров численного моделирования.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, выполнения индивидуальных заданий по каждой теме, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 2 часа.

Первая часть содержит один вопрос, проверяющий ИПК-1.2. Ответ на вопрос первой части дается в развернутой форме.

Вторая часть содержит 1 вопрос, проверяющий ИПК-1.1 и ИПК-1.3 и оформленный в виде практической задачи. Ответ на вопрос второй части предполагает решение индивидуальной задачи и краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Различные потенциалы межмолекулярного взаимодействия.
2. Силы притяжения и отталкивания. Потенциальная яма.
3. Поверхностные и объемные углеродные кристаллы. Дискретное представление взаимодействия нанообъектов.
4. Континуальное представление взаимодействия нанообъектов.
5. Энергия воздействия от бесконечной моноатомной нанонити, бесконечной нанотрубки.
6. Континуальное представление взаимодействия нанообъектов. Сглаженная энергия поверхностных и объемных кристаллов.
7. Энергия воздействия от сферы, от шара.
8. Кристаллические решетки. Эффективные размеры наночастиц.
9. Проницаемость и селективность мембраны.

10. Теорема о моменте количества движения. Динамические уравнения Эйлера.
11. Кинематические соотношения Эйлера. Матрица поворота
12. Учет магнитных и электрических сил в системе динамических уравнений Эйлера.
13. Вращение нанотрубки в газовой среде. Сила сопротивления среды
14. Интегральный потенциал нанотора. Жидкие кристаллы

Примеры практических задач:

Задача 1. Используя континуальную модель взаимодействия плоского фрагмента листа графена и пробной молекулы газа, найти проницаемость (методом однородного эквивалентного слоя) молекулой углекислого газа мембраны, составленной 3 листами деформированного графена ($q=14$), расположенными перпендикулярно оси Oy , параллельно друг другу на расстоянии 0,3 нм между соседними. Начальные данные: $x_0 = 0$ нм, $y_0 = -5$ нм, $z_0 = 0$ нм, $u_0 = 0$ м/с, $v_0 = 780$ м/с, $w_0 = 0$ м/с.

Задача 2. Используя континуальную модель взаимодействия бесконечной нанотрубки и пробной молекулы газа, найти проницаемость (методом “стрельбы”) атомом гелия полотна составленного 8 открытыми трубками, радиуса 0,475 нм с осями, параллельными Oz , расположенными в одной плоскости на расстоянии 1,25 нм друг от друга по 4 в положительном направлении оси Ox и в отрицательном. Начальные данные: $x_0 = 0$ нм, $y_0 = -5$ нм, $z_0 = 0$ нм, $u_0 = 0$ м/с, $v_0 = 1360$ м/с, $w_0 = 0$ м/с.

Задача 3. Используя дискретную модель взаимодействия сферической частицы и пробной молекулы газа, найти проницаемость (методом “стрельбы”) молекулой метана и атомом гелия фрагмента фуллерита составленного 16 фуллеренами C_{60} , расположенными в одной плоскости, перпендикулярной оси Oy , на расстоянии 1 нм между центрами соседних фуллеренов по 4 в ряд, в 4 параллельных оси Ox ряда. Начальные данные: $x_0 = 0$ нм, $y_0 = -5$ нм, $z_0 = 0$ нм, $u_0 = 0$ м/с, $v_0 = 680$ м/с, $w_0 = 0$ м/с.

При решении практической задачи и ответе на теоретический вопрос оценивается полнота, точность решения заданий, логичность и аргументированность изложения материала, умения использовать в ответе фактический материал. Для выставления оценки рекомендуется использовать следующую таблицу.

Оценка результатов контроля СРС	Критерии соответствия
(отлично)	Дан правильный и развернутый ответ на вопрос или полностью решена практическая задача. Студент четко и логично изложил свой ответ на поставленный вопрос.
(хорошо)	Дан правильный ответ на вопрос, но не все изложено развернуто и логически структурировано. Частично решена практическая задача, верно представлен общий ход решения, незначительные ошибки в ходе решения.
(удовлетворительно)	В целом дан правильный ответ на вопрос, но он изложен поверхностно и с нарушением логики изложения. Частично

	решена практическая задача, имеются значительные ошибки в ходе решения.
(неудовлетворительно)	<p>Ответ представлен очень поверхностно и с нарушением логики изложения. Студент очень плохо владеет основными моделями и концепциями. Допущены существенные терминологические и фактические ошибки.</p> <p>Дан неправильный ответ, однозначно неправильный ход решения практической задачи.</p>

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Итоговая оценка суммируется из оценок за обе части. Ниже приведена формула расчета итоговой оценки:

$$S = \sum_{i=1}^2 d_i / 2,$$

где S – итоговая оценка за экзамен, d_i – баллы за i -ую часть: «отлично» – 5 баллов, «хорошо» – 4 балла, «удовлетворительно» – 3 балла, «неудовлетворительно» – 2 балла. Итоговая оценка округляется в пользу студента при значении дроби превышающем 0,5.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=11436>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа.- М.: Дрофа, 2003. – 840 с.
- Андреев В.К., Гапоненко Ю.А., Гончарова О.Н., Пухначев В.В. Современные математические модели конвекции. – М.: Физматлит, 2008. – 368 с.
- Рудяк В.Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. Новосибирск: НГАСУ. 2004. 320 с.
- Рыжонков Д.И. Наноматериалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Д.И. Рыжонков, В.В. Лёвина, Э.Л. Дзидзигури. – 3-е изд. (эл.). – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 365 с.
- Томилов Е.Д. Теоретическая механика Ч.1, Ч.2. – Томск, Издательство ТГУ, 1970. – 317с.
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum mechanics. Non-relativistic Theory. Vol. 3 of Theoretical Physics (Pergamon press, London, 1965), pp. 60--80.
- Morse, P.M., Feshbach, H.: Methods of Theoretical Physics, Part II: Pt. 2 (Pure and Applied Physics). McGraw-Hill. 1953.
- Kruger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G. Vigen E.M. The Lattice Boltzmann Method. Springer International Publishing Switzerland 2017.
- Mohamad A. A. Lattice Boltzmann Method: Springer-Verlag London Ltd., part of Springer Nature 2019.

б) дополнительная литература:

- Гебхарт Б., Джалурия Й., Махаджан Р., Саммакия Б. Свободноконвективные течения, тепло- и массообмен. – М.: Мир, 1991. – Т. 1. – 678 с.

– Andreas W. Hauser, Joshua Schrier, Peter Schwerdtfeger. Helium Tunneling through Nitrogen-Functionalized Graphene Pores: Pressure- and Temperature-Driven Approaches to Isotope Separation // The Journal of Physical Chemistry C 2012, 116, 19. 10819-10827

– Qu, Y., Li, F., Zhou, H. et al.: Highly Efficient Quantum Sieving in Porous Graphene-like Carbon Nitride for Light Isotopes Separation // Scientific Reports. 6, 19952 (2016).

– Alfonso Gijón, José Campos-Martínez, Marta I. Hernández. Wave Packet Calculations of the Quantum Transport of Atoms through Nanoporous Membranes // The Journal of Physical Chemistry C 2017, 121, 19751--19757.

– Kampe de Feriet, J.: Fonctions de la physique mathématique. Paris, Centre National de la Recherche Scientifique. 1957.

– Wolf-Gladrow D.A. Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000.

– Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Clarendon Press. Oxford, 2001.

– Sukop M.C. Thorne Jr. D.T. Lattice Boltzmann Modeling. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.

в) ресурсы сети Интернет:

• <https://flowvision.ru/> – сайт российского разработчика программных комплексов вычислительной гидродинамики

• <http://www.ansys.com/> – сайт разработчика программных комплексов вычислительной гидродинамики

• <http://www.study.com/> – сайт с обучающими предметными видеоматериалами

• <http://www.openedu.ru/> – сайт обучающих курсов ведущих вузов России

<http://www.coursera.org/> – сайт обучающих курсов ведущих вузов мира

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.);

– средства разработки приложений и СУБД: Microsoft Visual Studio 2015;

– PascalABC.NET

– математический пакет: PTC Mathcad 15, MatLab

– пакеты математической и графической обработки данных: Golden Software Grapher, Golden Software Surfer

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Компьютерные классы для выполнения лабораторных и практических работ.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Гибанов Никита Сергеевич, к.ф.-м.н., доцент, кафедра теоретической механики механико-математического факультета ТГУ

Потеряева Валентина Александровна, старший преподаватель, кафедра теоретической механики механико-математического факультета ТГУ

Челнокова Анна Сергеевна, старший преподаватель кафедры теоретической механики механико-математического факультета ТГУ