

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Одеський державний екологічний університет

ЗАТВЕРДЖЕНО

на засіданні групи забезпечення спеціальності
від « 31 » 08 20 20 року
протокол № 1
Голова групи д.ф.-м.н., проф. Хецеліус О.Ю.

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

<u>Обчислювальні методи динаміки класичних та квантових систем</u>			
(назва навчальної дисципліни)			
<u>113 – Прикладна математика</u>			
(шифр та назва спеціальності)			
<u>Прикладна математика класичних та квантових систем</u>			
(назва освітньої програми)			
<u>Третій</u>			<u>Денна</u>
(рівень вищої освіти)			(форма навчання)
<u>перший</u>	<u>2</u>	<u>4/120</u>	<u>Залік</u>
(рік навчання)	(семестр навчання)	(кількість кредитів ЄКТС/годин)	(форма контролю)
<u>кафедри вищої та прикладної математики</u>			
(кафедра)			

Одеса, 2020 р.

Автори:

завідувач кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., проф.

Глушков О.В.,

професор кафедри вищої та прикладної математики, д.ф.-м.н., проф.

Хецеліус О.Ю.,

доцент кафедри вищої та прикладної математики, к.ф.-м.н., доц.

Серга І. М.,

доцент кафедри вищої та прикладної математики, к.ф.-м.н., доц.

Чернякова Ю.Г.

Поточна редакція розглянута на засіданні кафедри вищої та прикладної математики від « 31 » 08 20 20 року, протокол № 1 .

Перелік попередніх редакцій

Прізвища та ініціали авторів	Дата, № протоколу	Дата набуття чинності
Глушков О.В., Хецеліус О.Ю., Серга І.М., Чернякова Ю.Г.	31.08.2018 р., № 1	03.09.2018 р.
Глушков О.В., Хецеліус О.Ю., Свинаренко А.А., Ігнатенко Г.В.	09.06.2016 р., № 10	01.09.2016 р.

ЗМІСТ

1. Глосарій.....	4
2. Опис навчальної дисципліни.....	5
3. Мета та завдання навчальної дисципліни.....	6
4. Схема навчальної дисципліни.....	7
5. Програма лекційних блоків.....	8
6. Програма практичних блоків.....	17
7. Програма блока наукової роботи.....	25
8. Організація самостійної роботи аспірантів.....	25
9. Індивідуальні завдання, курсові роботи	26
10. Організація поточного, семестрового та підсумкового контролю знань аспірантів.....	27
11. Література.....	31

1. ГЛОСАРІЙ

- І** – іспит
- З** – залік
- ІЗ** – індивідуальне завдання
- КР** – контрольна робота
- КуР** – курсова робота
- ЛЗ** – лекційне заняття
- УО** – усне опитування
- ВЗ** – перевірка виконання індивідуального завдання
- ОЗЕ** – кількісна оцінка (у відсотках від максимально можливої) заходів контролю СРС під час проведення аудиторних занять
- ВІЗ** – виконання індивідуального завдання
- ВКуР** – виконання курсової роботи
- ВЛБ** – вивчення певних тем лекційного блоку
- ПІЗ** – перевірка індивідуального завдання
- ПКР** – перевірка контрольної роботи
- ПКуР** – перевірка курсової роботи
- ПЛЗ** – підготовка до лекційних занять
- ПМКР** – підготовка до контрольної роботи
- ПУОП** – підготовка до усного опитування під час практичних занять
- ПО** – підсумкова оцінка

2. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Таблиця 1

Найменування показників	Галузь знань, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристики навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів ECTS 4	Галузь знань: 11. Математика та статистика	Нормативна	
	Рівень освіти: Третій		
Змістовних блоків: лекційних: 7 практичних: 4 3	Спеціальність: 113 – Прикладна математика	Рік підготовки	
		1	1
		Семестр	
		2	2
Індивідуальні завдання: денна форма - індивідуальне завдання - 1 курсова робота - 1 заочна форма - індивідуальне завдання - 1 курсова робота - 1	Освітньо-кваліфікаційний рівень: Доктор філософії	Лекційні заняття	
		45	10
		Практичні заняття	
		30	10
		Самостійна робота	
		45	100
		Індивідуальні завдання	
Загальна кількість годин: денна -120; заочна - 120		Форма підсумкового Контролю	
		3	3
Співвідношення годин (%):	аудиторні заняття самостійна індивідуальна робота	денна 62.5	заочна 17.0
		37.5	83.0

3. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Дисципліна «Обчислювальні методи динаміки класичних та квантових систем» є обов'язковою дисципліною у циклі професійної підготовки аспірантів (3 рівень освіти) за спеціальністю 113- Прикладна математика.

Вона спрямована на засвоєння (забезпечення) низки запланованих компетентностей, у т.ч., вивчення сучасного апарату обчислювальної математики класичних та квантових систем, а також розвиток нових обчислювальних методів та алгоритмів динаміки систем з можливим узагальненням на різноманітні класи математичних, фізико-хімічних, кібернетичних, соціально-економічних, екологічних систем, здатність аналізувати дані комп'ютерних експериментів із дослідження характеристик лінійних і нелінійних процесів у складних системах, взагалі різноманітних систем у сфері прикладної математики, які можуть бути великого обсягу та вимагати застосування потужних обчислювальних ресурсів, використання сучасних існуючих та нових розвинутих обчислювальних методів з метою досягнення наукових результатів, які створюють потенційно нові знання в обчислювальній прикладній математиці.

Місце дисципліни у структурно-логічній схемі її викладання: отримані знання при вивченні даної дисципліни використовуються при написанні дисертаційних робіт, тематика яких пов'язана із розвитком нових обчислювальних методів та алгоритмів динаміки складних хаотичних систем з можливим узагальненням на різноманітні класи математичних, фізико-хімічних, кібернетичних, соціально-економічних, екологічних систем. Основні поняття дисципліни – це базовий інструментарій фахівця у галузі прикладної математики.

Метою вивчення дисципліни є засвоєння (забезпечення) низки компетентностей, зокрема, досягнення відповідних знань, розуміння та здатності використання методів аналізу даних і статистики на найсучаснішому рівні, уміння використовувати стандартні та будувати нові на основі нових математичних підходів програмні продукти, до потреб дисертаційного дослідження, адаптувати, удосконалювати обчислювальні методи та алгоритми для чисельного дослідження характеристик лінійних та нелінійних процесів у складних класичних та квантових системах.

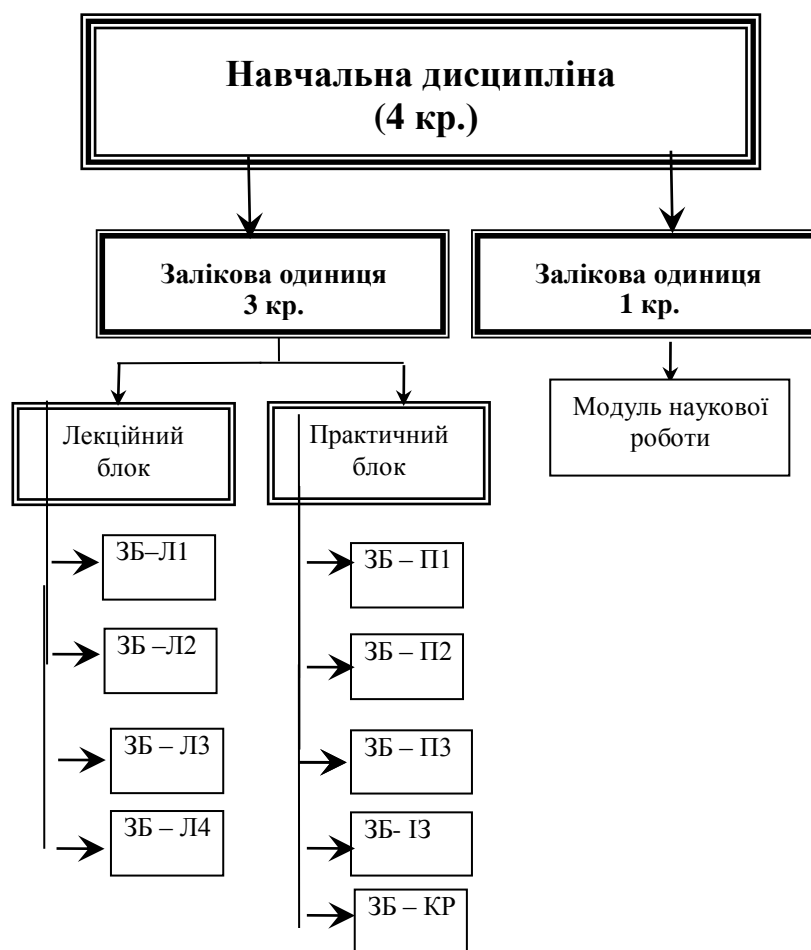
Загальний обсяг навчального часу, що припадає на вивчення дисципліни, становить по **150** год. для денної і заочної форми навчання відповідно.

Після засвоєння цієї дисципліни аспірант повинен уміти використати сучасні або особисто розвинуті нові обчислювальні методи, зокрема, до аналізу, моделювання, прогнозування, програмування динаміки класичних та квантових систем з постановкою відповідних комп'ютерних експериментів.

Вивчення дисципліни «Обчислювальні методи динаміки класичних та квантових систем» проводиться на першому році навчання (2 семестр; денна і заочна форми навчання) і передбачає лекційні та практичні заняття. Види контролю поточних знань – контрольні та курсова роботи, опитування, залік.

4. СХЕМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

(Дисципліна містить навчальний курс загальним обсягом 300 годин, індивідуальне завдання міститься у практичному модулі)



5. ПРОГРАМА ЛЕКЦІЙНИХ БЛОКІВ

Таблиця 2

Змістовні модулі	Назва змістовного блока	Назва теми	Денна форма				Заочна форма			
			Кількість аудиторних годин	Кількість годин СРС	Завдання на СРС	Форми поточного контр. СРС	Кількість аудиторних годин	Кількість годин СРС	Завдання на СРС	Форми поточного контр. СРС
ЗБ- Л1	Чисельні методи алгебри у розв'язанні розв'язування задач динаміки класичних та квантових систем	Поглиблена теорія наближених методів розв'язування задач динаміки класичних та квантових систем. Питання оптимізації методів комп'ютерного розв'язування задач динаміки. Чисельні методи алгебри. Елементи теорії операторів та матриць. Чисельні методи знаходження власних значень та власних векторів матриці. Ітераційний метод. Метод Данилевського знаходження коефіцієнтів характеристичного рівняння. Метод скалярних добутків знаходження максимального власного значення симетричної матриці. Метод теорії збурень в задачах знаходження власних значень та власних векторів. Спектр оператора. Спряжені, самоспряжені, симетричні, додатково визначені, цілком неперервні оператори та їх спектральні властивості. знаходження власних значень (методи Рітца, Бубнова-Гальоркіна, найменших квадратів). Задачі на власні значення для диференційних рівнянь. Ермітово спряжені та спряжені крайові задачі. Прямі та інтеграційні методи розв'язування систем лінійних рівнянь з повними матрицями та матрицями спеціального виду для динаміки класичних та квантових систем. Чебишевські одно крокові (тричленні) ітераційні методи. Методи спряжених градієнтів розв'язування лінійних систем і спектральних задач. Застосування методів регуляризації, мінімізації згладжую чого функціоналу та ітераційних методів до розв'язування вироджених, несумісних та погано обумовлених систем лінійних алгебраїчних рівнянь.	5	4	ПЛЗ		2	12	ПЛЗ	
			5	4	ПУОП	УО	ПУОП		УО	ПЛЗ

ЗБ- Л2	Поглиблені методи чисельної інтерполяції. диференціювання. Математичні основи теорії інтегральних (інтегро-диференціальних) рівнянь. Спеціальні функції математичної фізики.	Чисельна інтерполяція та диференціювання. Загальні властивості ортогональних систем многочленів. Многочлени Лежандра і Чебишева; їх властивості та застосування. Кусково-визначені апроксимації функцій методу скінчених елементів, їх властивості та застосування. Методи спуску для пошуку екстремуму функціоналів. Спеціальні функції математичної фізики. Класичні ортогональні поліноми, поліноми Чебишева, Ерміта. Елементи теорії гіпергеометричних функцій: визначення та властивості. Рівняння Бесселя і циліндричні функції. Сферичні функції. Поліноми Лежандра, приєднані поліноми Лежандра. Чисельне інтегрування. Задача оптимізації квадратури. Спрощені квадратурні. Багатовимірні інтерполяційні, симетричні квадратурні формули. Математичні основи теорії інтегральних (інтегро-диференціальних) рівнянь. Інтегральні рівняння Фредгольма: Поглиблений розгляд. Резольвента Фредгольма. Удосконалені методи Неймана, Фредгольма. Поняття про діаграмну техніку. Рівняння з виродженими ядрами. Рівняння Вольтера: Поглиблений розгляд. Рівняння Вольтера з різницевиими ядрами. метод інтегральних перетворень. Функція Гріна звичайного диференціального оператора. Аналітичні властивості функції Гріна. Рівняння Гельмгольца і Шредінгера. Рівняння Гельмгольца в необмеженій області. Рівняння математичної фізики у частинних похідних вищих порядків.	5	4	ПЛЗ		2	12	ПЛЗ	УО
			5	4	ПУОП				ПУОП	УО
					ПЛЗ				ВЛБ	УО
ЗБ- Л3	Обчислювальні методи розв'язку крайових задач для рівнянь динаміки класичних та квантових систем. Чисельні методи	Варіаційне числення. Метод Гальоркіна і варіаційний метод у кінцево-елементному формулюванні Чисельні методи, що використовуються у розв'язанні задач теплообміну. Метод Гальоркіна і варіаційний метод з використанням глобальних базисних функцій. Метод коллокацій Інтегральний метод - окремий випадок методу моментів. Метод теорії збурень у розв'язанні рівнянь з частинними похідними другого порядку. Оптимізація нульового на-	8	4	ПЛЗ		3	12	ВЛБ	УО
					ПУОП	УО			ВЛБ	УО

	<p>в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміки, хаосу</p>	<p>ближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібровочно-інваріантні схеми. Нелінійні двохкрапкові крайові задачі. Метод кінцевих елементів. Чисельні методи в задачах моделювання процесів теплообміну, конвекції, випромінювання, переносу енергії і маси. Двовимірний потік випромінювання. Спільна дія теплопровідності, конвекції і випромінювання. Ламінарні режими природної і змішаної конвекції плинину в прикордонному шарі у межах рівнянь параболічного типу. Чисельне моделювання подовжньої дифузії та розв'язання відповідних рівнянь еліптичного типу. Чисельні методи, використовувані в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміки та хаосу. Чисельні моделі для опису основних властивостей турбулентних плиннів. Визначальні рівняння. Моделі турбулентності різних порядків, теорії замикання. Чисельні рішення рівнянь які описують регулярну і стохастичну динаміку одно- та багатовимірних систем. Чисельні методи у фрактальній геометрії та теорії хаосу. Властивості фрактальних множин. Чисельні алгоритми обчислення спектру фрактальних розмірностей, топологічних та динамічних інваріантів класичних та квантових систем. Метод вейвлет-розкладання та обчислення спектру фрактальних розмірностей. Чисельні методи моделювання явищ класичного та квантового хаосу в динаміці класичних та квантових систем. Методи математичного та нейромережевого програмування, теорії ігор в задачах теорії хаосу. Елементи теорії програмування та розрахунків на ПК. Алгоритмічна мови «Фортран», C++, інші. Комплекс програм «Geomath».</p>	5	4	ПЛЗ	УО	1			
--	---	--	---	---	-----	----	---	--	--	--

ЗБ- Л4	Обчислювальні методи сучасної механіки, динаміки квантових систем. Методи теорії самоузгодженого поля.	Чисельні основи формалізму теорії збурень (для вироджених та невиражених станів). Секулярна теорія збурень. Чисельні методи розв'язання рівнянь динаміки квантових систем (Шредінгера, Дірака, Клейна-Гордона-Фока). Чисельні алгоритми методів теорії самоузгодженого поля (Хартрі-Фока, Хартрі-Слетера, Х-метод, Дірака-Фока, Дірака-Кона-Шема). Чисельні алгоритми наближених методів модельного потенціалу, квантового дефекту, Томаса-Фермі та функціонала густини. Релятивістське рівняння Дірака для електрона у зовнішньому полі. Метод багаточастинкової теорії збурень з Хартрі-Фоківським (дірак-фоківським) нульовим наближенням. Чисельні основи релятивістської (КЕД) багаточастинкової теорії збурень в задачах квантової геометрії, механіки, динаміки. Елементи Фейнманівської діаграмної техніки. Теорія розв'язання рівнянь Хартрі-Фоку для електронів в атомах, молекулах, кристалах. Алгебраїчна проблема власних значень для рівнянь динаміки квантових систем. Обчислення інтегралів перекриття хвильових функцій, матричних елементи операторів кінетичної енергії, електронно-ядерної, електрон-електронної кулонівської та обмінної взаємодії. Оптимізація нульового наближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібрувально-інваріантні схеми. Математичні основи теорії міжелектронних кореляцій (ефекти поляризаційної взаємодії, екранувальні ефекти, ітерації масового оператора). Функція Гріна рівняння Дірака з несингулярним потенціалом та комплексною енергією	5	5	ПЛЗ		3	14	ВЛМ	УО
			7	6	ПМКР (ПО)	УО			КР	ПМКР (ПО)
Підготовка до заліку										
Всього			45	45			10	60		

Після вивчення лекційних змістовних блоків студенти мають оволодіти наступними знаннями.

ЗБ-Л1. Визначення та властивості операторів та матриць. Чисельні методи знаходження власних значень та власних векторів матриці. Ітераційний метод. Метод скалярних добутків знаходження максимального власного значення симетричної матриці. Метод теорії збурень в задачах знаходження власних значень та власних векторів. Спектр оператора. Спряжені, самоспряжені, симетричні, додатково визначені, цілком неперервні оператори та їх спектральні властивості. Знаходження власних значень (методи Рітца, Бубнова-Гальоркіна, найменших квадратів). Задачі на власні значення для диференціальних рівнянь. Ермітово спряжені та спряжені крайові задачі. Прямі та інтеграційні методи розв'язування систем лінійних рівнянь з повними матрицями та матрицями спеціального виду для динаміки класичних та квантових систем. Чебишевські одно крокові (тричленні) ітераційні методи. Методи спряжених градієнтів розв'язування лінійних систем і спектральних задач

Найвне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука, 1972.
7. Glushkov A.V. , Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Екологія, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Екологія, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: TEC, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear

Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.

16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: ТЕС.-2014.-405С.

ЗБ-Л2. Техніка Чисельна інтерполяція та диференціювання. Загальні властивості ортогональних систем многочленів. Многочлени Лежандра і Чебишева; їх властивості та застосування. Кусково-визначені апроксимації функцій методу скінчених елементів, їх властивості та застосування. Методи спуску для пошуку екстремуму функціоналів. Спеціальні функції математичної фізики. Класичні ортогональні поліноми, поліноми Чебишева, Ерміта. Елементи теорії гіпергеометричних функцій: визначення та властивості. Рівняння Бесселя і циліндричні функції. Сферичні функції. Поліноми Лежандра, приєднані поліноми Лежандра. Чисельне інтегрування. Задача оптимізації квадратури. Багатовимірні інтерполяційні, симетричні квадратурні формули. Математичні основи теорії інтегральних (інтегродиференціальних) рівнянь. Інтегральні рівняння Фредгольма. Удосконалені методи Неймана, Фредгольма. Поняття про діаграмну техніку. Рівняння з виродженими ядрами. Рівняння Вольтера: поглиблений розгляд. Рівняння Вольтера з різницевидами ядрами. метод інтегральних перетворень. Функція Гріна звичайного диференціального оператора. Рівняння Гельмгольца і Шредінгера. Рівняння Гельмгольца в необмеженій області.

Нааявне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука,1972.
7. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: ТЕС, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Екологія, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Екологія, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: ТЕС, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: ТЕС, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical

- methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
 15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
 16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: ТЕС.- 2014.-405С.

ЗБ-ЛЗ. Метод Гальоркіна і варіаційний метод у кінцево-елементному формулюванні Чисельні методи, що використовуються у розв'язанні задач теплообміну. Метод Гальоркіна і варіаційний метод з використанням глобальних базисних функцій. Метод коллокацій Інтегральний метод - окремий випадок методу моментів. Метод теорії збурень у розв'язанні рівнянь з частинними похідними другого порядку. Калібровочно-інваріантні схеми. Метод кінцевих елементів. Чисельні методи в задачах моделювання процесів теплообміну, конвекції, випромінювання, переносу енергії і маси. Двовимірний потік випромінювання. Чисельні методи, використовувані в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміка та хаосу. Чисельні моделі для опису основних властивостей турбулентних плинів. Моделі турбулентності різних порядків, теорії замикання. Чисельні рішення рівнянь які описують регулярну і стохастичну динаміку одно- та багато-вимірних систем. Чисельні методи у фрактальній геометрії та теорії хаосу. Властивості фрактальних множин. Чисельні алгоритми обчислення спектру фрактальних розмірностей, топологічних та динамічних інваріантів класичних та квантових систем. Метод вейвлет-розкладання та обчислення спектру фрактальних розмірностей. Чисельні методи моделювання явищ класичного та квантового хаосу в динаміці класичних та квантових систем. Методи математичного та нейромережевого програмування, теорії ігор в задачах теорії хаосу.

Наявне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука, 1972.
7. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: ТЕС, 2015.-180P.

8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Экология, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Экология, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: ТЕС, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: ТЕС.-2014.-405С.

ЗБ-Л4. Чисельні методи розв'язання рівнянь динаміки квантових систем (Шредінгера, Дірака, Клейна-Гордона-Фока). Чисельні алгоритми методів теорії самоузгодженого поля (Хартрі-Фока, Хартрі-Слетера, Х-метод, Дірака-Фока, Дірака-Кона-Шема). Чисельні алгоритми наближених методів модельного потенціалу, квантового дефекту, Томаса-Фермі та функціонала густини. Релятивістське рівняння Дірака для електрона у зовнішньому полі. Метод багаточастинкової теорії збурень з Хартрі-Фоківським (дірак-фоківським) нульовим наближенням. Чисельні основи релятивістської (КЕД) багаточастинкової теорії збурень в задачах квантової геометрії, механіки, динаміки. Елементи Фейнманівської діаграмної техніки. Теорія розв'язання рівнянь Хартрі-Фоку для електронів в атомах, молекулах, кристалах. Алгебраїчна проблема власних значень для рівнянь динаміки квантових систем. Обчислення інтегралів перекриття хвильових функцій, матричних елементи операторів кінетичної енергії, електронно-ядерної, електрон-електронної кулонівської та обмінної взаємодії. Оптимізація нульового наближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібрувальні-інваріантні схеми. Математичні основи теорії міжелектронних кореляцій (ефекти поляризаційної взаємодії, екранувальні ефекти, ітерації масового оператора). Функція Гріна рівняння Дірака з несингулярним потенціалом та комплексною енергією.

Наявне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука,1972.
7. Glushkov A.V. , Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Экология, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Экология, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: TEC, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: TEC.-2014.-405С.

6. ПРОГРАМА ПРАКТИЧНИХ БЛОКІВ

Таблиця 3

Змістовні модулі	Назва змістовного блока	Назва теми	Денна форма				Заочна форма			
			Кількість аудиторних годин	Кількість годин СРС	Завдання на СРС	Форми поточного контролю СРС	Кількість аудиторних годин	Кількість годин СРС	Завдання на СРС	Форми поточного контролю СРС
ЗБ- П1	Динаміка диференціальних рівнянь та елементи теорії катастроф. Елементи теорії фракталів та мультіфракталів	Динаміка диференціальних рівнянь. Інтегрування лінійних та нелінійних рівнянь другого порядку. Динаміка у фазовій площині. Фазовий портрет маятника та консервативних систем. Аналіз стійкості. Матриця стійкості. Класифікація нерухомих точок. Лімітні цикли. Приклади динамічних систем. Елементи теорії катастроф. Катастрофи корозмірності. Динамічні системи та біфуркації. Питання структурної стійкості. Теорія локальних і гомоклінічних біфуркацій. Інваріантні тори. Теорема про центральне різноманіття. Біфуркації одновимірних потоків, Андронова-Хопфа, лімітних циклів, 1-Д, 2-Д, 3-Д параметричних одновимірних відображень. Нестійкі та стійкі різноманіття. Біфуркації та синхронізації в системах типу Ван-дер-Поля. Канторові множини. Самоподібність та арифметичні властивості. Логістична парабола та подвоєння періодів. Феномен скейлінгу. Касательні біфуркації, перемежаємість та $1/f$ шум. Множини Мандельброта. Множина Жюлі комплексного квадратичного відображення. Визначення фракталу (мультіфракталу). Обчислення фрактальної розмірності. Кореляційна розмірність. Визначення фрактальної розмі-	5	5	ПУОП	УО	1	3	ПУОП	УО
			5		ПУОП	УО	1	3	ПУОП	УО

		рності на основі узагальнених ентропій. Визначення кореляційної розмірності по часовим рядам. Мультифрактали на фракталах. Співвідношення між мультифрактальним спектром и показниками маси. Дивні атрактори як мультифрактали. Фрактали та комплексна аналітична динаміка, турбулентності, переносу енергії, маси.								
ЗБ- П2	Геометрія фазового простору. Теорія хаосу. Хаотична динаміка дисипативних систем.	Визначення хаосу та його властивостей. Критерії локального хаосу. Показники Ляпунова та спектр потужності. Критерії виникнення глобального хаосу. Метод перекриття резонансів. Метод Гріна. Тест Готтвода і Мелбена. Геометрія фазового простору. Обчислення часової затримки τ за допомогою автокореляційної функції чи взаємної інформації. Визначення розмірності вкладення d_E за методом кореляційної розмірності чи алгоритму хибних найближчих сусідніх точок. Розрахунок мультифрактальних спектрів. Метод кореляційного інтегралу. Вейвлет-аналіз. Визначення та обчислення глобальних розмірностей Ляпунова λ_α , розмірності Каплана-Йорка d_L , ентропії Колмогорова, середньої межі передбачуваності Pr_{max} . Хаос-геометричний підхід до прогнозування нелінійної динаміки хаотичних систем: Визначення кількості найближчих сусідніх точок NN для найкращих результатів прогнозу. Методи нелінійного прогнозу еволюційної динаміки хаотичних систем: Нейромережевий алгоритм, алгоритм передбачених траєкторій. Хаотична динаміка дисипативних систем. Статистичні по-	5	5	ПУОП	УО	2	3	ПУОП	УО
			5		ПУОП	КР	2	4	ПУОПР	УО

		няті сильно хаотичних систем. Дисипативні системи та турбулентність. Теорія Ландау-Хопфа. Теорія біфуркацій Хопфа. Теорія Рюеля-Текенса. Математичні моделі дивних атракторів. Модель Лоренца та відображення Хенона. Біфуркації подвоєння періоду та різні класи універсальності. Нелінійний аналіз та прогнозування еволюційної хаотичної динаміки економічних, екологічних, нейрофізіологічних та інших систем. Приклади тестування хаосу в часових рядах та нелінійних моделей прогнозування.).								
ЗБ- ПЗ	Елементи теорії квантового хаосу. Хаос в квантових і лазерних системах	Хаос та інтегруємість у квазікласичній механіці. Нелінійні хаотична динаміка квантових систем. Квазіперіодична квантова механіка. Інтегруємі системи. Метод ВКБ та умови квантування Бора-Зомерфельда. Квантовий хаос. Формула сліду Гутцвіллера. Внески у густину станів. Випадкові матриці. Гаусови ансамблі. Метод суперсиметрії. Гамільтоніан з періодичною залежністю від часу. Динамічна локалізація. Наближення сильного зв'язку. Спектральні кореляції. Спектральний аналіз, статистика енергетичного спектру, розподіл Вігнера, спектр потужності і, «спектральна жорсткість». Спектр потужності та принцип відповідності. Розподіл відстань між рівнями. Критерій Чирикова. Хаотичні особливості динаміки атомних систем в постійному електричному, магнітному та електромагнітному по-	5	5	ПУОП	УО	2	3	ПУОП	УО
			5		ПМКР	КР	2	4	ПМКР	КР (ПО)

		лях. Хаос в динаміці молекулярних систем в електромагнітному полі. Приклад динамічного хаосу. Нелінійний аналіз хаотичних коливань в сітці двох квантових генераторів. Аналіз генерації хаосу в напівпровідникових GaAs / GaAlAs лазерних системах із запізнілим зворотнім зв'язком. Аналіз генерації хаосу в ербієвому однокільцевому волоконному лазері. Нелінійна динаміка релятивістських ламп зворотної хвилі (ЛЗХ) в самомодуляційному та хаотичного режимах та її опис на основі методів теорії хаосу. Спрощена якісна теорія та приклади її застосування до опису нелінійної динаміки релятивістських ЛЗХ. Нелінійна динаміка релятивістської ЛЗХ в автомодуляційному та хаотичному режимах у врахуванням ефектів відбиття хвиль, просторового поля заряду і дисипації.								
ІЗ1	Індивідуальне завдання		-	5	ПІЗ	ВІЗ	X	10	X	X
КуР1	Курсова (дослідницька) робота КуР		-	10	ПКуР	ВКуР	X	10		
		Всього	30	30			10	40		

Після вивчення практичних змістовних блоків студенти мають оволодіти наступними **вміннями**.

ЗМ-П1. Елементи теорії операторів та матриць. Чисельні методи знаходження власних значень та власних векторів матриці. Ітераційний метод. Метод скалярних добутків знаходження максимального власного значення симетричної матриці. Метод теорії збурень в задачах знаходження власних значень та власних векторів. Спектр оператора. Спряжені, самоспряжені, симетричні, додатково визначені, цілком неперервні оператори та їх спектральні властивості. знаходження власних значень (методи Рітца, Бубнова-Гальоркіна, найменших квадратів). Прямі та інтеграційні методи розв'язування систем лінійних рівнянь з повними матрицями та матрицями спеціального виду для динаміки класичних та квантових систем. Чебишевські одно крокові (тричленні) ітераційні методи. Методи спряжених градієнтів розв'язування лінійних систем і спектральних задач. Чисельна інтерполяція та диференціювання. Многочлени Лежандра і Чебишева; Кусково-визначені апроксимації функцій методу скінчених елементів. Методи спуску для пошуку екстремуму функціоналів. Спеціальні функції математичної фізики. Класичні ортогональні поліноми, поліноми Чебишева, Ерміта. Елементи теорії гіпергеометричних функцій: визначення та властивості. Рівняння Бесселя і циліндричні функції. Сферичні функції. Поліноми Лежандра, приєднані поліноми Лежандра. Чисельне інтегрування. Спрощені і багатовимірні інтерполяційні, симетричні квадратурні формули. Інтегральні рівняння Фредгольма. Резольвента Фредгольма. Удосконалені методи Неймана, Фредгольма. Поняття про діаграмну техніку. Рівняння з виродженими ядрами. Рівняння Вольтера: Поглиблений розгляд. Рівняння Вольтера з різницевиими ядрами. метод інтегральних перетворень. Функція Гріна звичайного диференціального оператора. Аналітичні властивості функції Гріна. Рівняння Гельмгольца і Шредінгера.

Найвне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука,1972.
7. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: ТЕС, 2015.-180Р.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Екология, 2008.

10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Экология, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: ТЕС, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: ТЕС, 2015.- 180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: ТЕС.- 2014.-405С.

ЗБ-П2 Варіаційне числення. Метод Гальоркіна і варіаційний метод у кінцево-елементному формулюванні . Метод Гальоркіна і варіаційний метод з використанням глобальних базисних функцій. Метод коллокацій Інтегральний метод - окремих випадок методу моментів. Метод теорії збурень у розв'язанні рівнянь з частинними похідними другого порядку. Оптимізація нульового наближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібровочно-інваріантні схеми. Нелінійні двохкрапкові крайові задачі. Метод кінцевих елементів. Чисельні методи в задачах моделювання процесів теплообміну, конвекції, випромінювання, переносу енергії і маси. Двовимірний потік випромінювання. Спільна дія теплопровідності, конвекції і випромінювання. Ламінарні режими природної і змішаної конвекції плинину в прикордонному шарі у межах рівнянь параболічного типу. Чисельне моделювання поперечної дифузії та розв'язання відповідних рівнянь еліптичного типу. Чисельні методи, використані в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміки та хаосу. Моделі турбулентності різних порядків, теорії замикання. Чисельні методи у фрактальній геометрії та теорії хаосу. Властивості фрактальних множин. Чисельні алгоритми обчислення спектру фрактальних розмірностей, топологічних та динамічних інваріантів класичних та квантових систем. Метод вейвлет-розкладання та обчислення спектру фрактальних розмірностей. Чисельні методи моделювання явищ класичного та квантового хаосу в динаміці класичних та квантових систем. Методи математичного та нейромережевого програмування, теорії ігор в задачах теорії хаосу. Елементи теорії програмування та розрахунків на ПК. Алгоритмічна мова «Фортран», С++, інші. Комплекс програм «Geomath».

Наявне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука, 1972.
7. Glushkov A.V. , Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Екологія, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Екологія, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: TEC, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: TEC.- 2014.-405С.

ЗБ-ПЗ. Чисельні методи розв'язання рівнянь динаміки квантових систем (Шредінгера, Дірака, Клейна-Гордона-Фока). Чисельні алгоритми методів теорії самоузгодженого поля (Хартрі-Фока, Хартрі-Слетера, Х –метод, Дірака-Фока, Дірака-Кона-Шема). Чисельні алгоритми наближених методів модельного потенціалу, квантового дефекту, Томаса-Фермі та функціонала густини. Релятивістське рівняння Дірака для електрона у зовнішньому полі. Метод багаточастинкової теорії збурень з Хартрі-Фоківським (дірак-фоківським) нульовим наближенням. Чисельні основи релятивістської (КЕД) багаточастинкової теорії збурень в задачах квантової геометрії, механіки, динаміки. Елементи Фейнманівської діаграмної техніки. Теорія розв'язання рівнянь Хартрі-Фоку для електронів в атомах, молекулах, кри-

сталах. Алгебраїчна проблема власних значень для рівнянь динаміки квантових систем. Обчислення інтегралів перекриття хвильових функцій, матричних елементи операторів кінетичної енергії, електронно-ядерної, електрон-електронної кулонівської та обмінної взаємодії. Оптимізація нульового наближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібрувальні-інваріантні схеми. Математичні основи теорії міжелектронних кореляцій (ефекти поляризаційної взаємодії, екранувальні ефекти, ітерації масового оператора). Функція Гріна рівняння Дірака з несингулярним потенціалом та комплексною енергією.

Наявне навчально-методичне забезпечення:

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука, 1972.
7. Glushkov A.V. , Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Екологія, 2008.
10. Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Екологія, 2011.
11. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: TEC, 2009.
12. Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
13. Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
15. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
16. Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: TEC.-2014.-405С.

7. ПРОГРАМА БЛОКІВ НАУКОВОЇ РОБОТИ

В умовах організації навчального процесу для аспірантів (третій рівень освіти) модуль «Наукова робота» є окремою принципово важливою заліковою одиницею. В рамках дисципліни «Обчислювальні методи динаміки класичних та квантових систем м» пропонуються наступні види наукової роботи: участь у написанні і підготовці до друку наукових статей та тез доповідей на міжнародних, вітчизняних наукових конференціях; участь у науково-дослідних темах кафедри, у т.ч., НДР теми МОН України, написання відповідних підрозділів дисертаційної роботи.

8. ОРГАНІЗАЦІЯ САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ АСПІРАНТІВ

Таблиця 4

Змістовні блоки	Денна форма				Заочна форма			
	Завдання на СРС	Кільк. годин СРС	Форми контр.СРС	Строки (тиждень)	Завдання на СРС	Кільк. годин СРС	Форми контр.СРС	Час проведення.
1	2	3	4	5	6	7	8	9
ЗБ-Л1	ПЛБ	8	УО	1-3 3	ПЛБ	12	УО	м/сес сесія
ЗБ-Л2	ПЛБ	8	УО	4-6 6	ПЛБ	12	УО	м/сес сесія
ЗБ-П1	ПУОП	5	УО	1-7 8	ПУОП	16	УО	Сесія
ЗБ-І3	ПІЗ	5	ПІЗ1	3-12 11	ПІЗ	10	ПІЗ	Сесія
ЗБ-Л3	ПЛБ	8	УО	7-10 10	ПЛБ	12	УО	м/сес сесія
ЗБ-П2	ПУОП	5	УО	8-12 12	ПУОП	16	УО	Сесія
ЗБ-Л4	ПМКР	11	ПКР	11-15 15	ПЛБ	14	УО	м/сес сесія
ЗБ-КуР	ПКуР	10	ПКуР	4-14 15	ВКуР	10	ПКуР	Сесія
ЗБ-П3	ПЛБ	5	УО	11-14 14	ПЛБ	18	УО	м/сес сесія
I (3)		10			ПІ	10		
	Разом:	75				130		

9. ІНДИВІДУАЛЬНЕ ЗАВДАННЯ ТА КУРСОВІ РОБОТИ

Індивідуальні завдання сприяють більш поглибленому вивченню аспірантом практичного матеріалу, формуванню вмінь використати знання для вирішення відповідних практичних завдань.

В рамках вивчення дисципліни «Обчислювальні методи динаміки класичних та квантових систем» для денної та заочної форм навчання індивідуальне завдання міститься у практичному модулі, яке представляє собою домашнє завдання з розв'язанням та письмовим оформленням задач.

Індивідуальне завдання виконується аспірантами самостійно у вільний від занять, зручний для них час, як правило, поза аудиторією, але із забезпеченням необхідних консультацій з окремих питань з боку викладача. Звіт про виконання ІЗ подається аспірантом у вигляді текстового документа з титульною сторінкою на аркушах формату А4. Звіт повинен містити детальну інформацію про розв'язання задачі з обов'язковими поясненнями, що спираються на відповідний теоретичний матеріал або детальний переказ теоретичного матеріалу з наведенням прикладів. Не пізніше ніж за 2 тижні до семестрового підсумкового контролю звіт подається викладачу. Оцінка за ІЗ виставляється в інтегральну відомість окремим блоком і враховується в практичній частині контролю.

Перелік тем індивідуальних завдань (ІЗ1. ІЗ2):

Тема індивідуального завдання, як правило, вибирається з урахуванням тематики дисертаційних досліджень аспірантів, а також може бути вибрана у наступному вигляді:

1. Метод Гальоркіна і варіаційний метод з використанням глобальних базисних функцій.
2. Метод теорії збурень у розв'язанні рівнянь з частинними похідними другого порядку. Калібровочно-інваріантні схеми.
3. Метод кінцевих елементів.
4. Чисельні методи в задачах моделювання процесів теплообміну, конвекції, випромінювання, переносу енергії і маси.
5. Чисельне моделювання подовжньої дифузії та розв'язання відповідних рівнянь еліптичного типу.
6. Чисельні методи, використовувані в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміка та хосу.
7. Чисельні моделі для опису основних властивостей турбулентних плинів.
8. Моделі турбулентності різних порядків, теорії замикання.
9. Чисельні методи у фрактальній геометрії та теорії хаосу. Властивості фрактальних множин.
10. Чисельні алгоритми обчислення спектру фрактальних розмірностей, топологічних та динамічних інваріантів класичних та квантових систем.

Перелік тем курсових (дослідницьких) робіт (КуР1, КуР2).

Тема курсової (дослідницької) роботи, як правило, вибирається з урахуванням тематики дисертаційних досліджень аспірантів, а також може бути вибрана у наступному вигляді:

1. Чисельні методи розв'язання рівнянь динаміки квантових систем (Шредінгера, Дірака, Клейна-Гордона-Фока).
2. Чисельні алгоритми методів теорії самоузгодженого поля (Хартрі-Фока, Хартрі-Слетера, Х-метод, Дірака-Фока, Дірака-Кона-Шема).
3. Чисельні алгоритми наближених методів модельного потенціалу, квантового дефекту, Томаса-Фермі та функціонала густини.
4. Релятивістське рівняння Дірака для електрона у зовнішньому полі: Чисельне розв'язання.
5. Метод багаточастинкової теорії збурень з Хартрі-Фоківським (дірак-фоківським) нульовим наближенням.
6. Чисельні основи релятивістської (КЕД) багаточастинкової теорії збурень в задачах квантової геометрії, динаміки.
7. Теорія розв'язання рівнянь Хартрі-Фоку для електронів в атомах, молекулах, кристалах.
8. Математичні основи теорії міжелектронних кореляцій (ефекти поляризаційної взаємодії, екранувальні ефекти, ітерації масового оператора).
9. Функція Гріна рівняння Дірака з несингулярним потенціалом та комплексною енергією.
10. Функція Гріна рівняння Шредінгера з сингулярним потенціалом та комплексною енергією.

10. Організація поточного, семестрового та підсумкового контролю знань аспірантів

Поточна та підсумкова оцінка рівня знань студентів здійснюється за блоковою системою.

Теоретична частина дисципліни розбита на 4 лекційних змістовних блоків, формою контролю кожного з них є контрольна робота, усне опитування (КР, УО).

Практична частина дисципліни розбита на 3 практичних змістовних блоки, 1 індивідуальне завдання ІЗ та 1 курсову (дослідницьку) роботу КуР. Формою контролю роботи аспіранта на практичних заняттях є усне опитування під час проведення занять (УО), контрольна робота (КР), виконання індивідуальних завдань (ВІЗ), курсової роботи (ВКуР),

Для аспірантів денної та заочної форм навчання питання про допуск до заліку регламентується таким чином: аспірант вважається допущеним до підсумкового контролю з дисципліни, якщо він виконав усі види робіт, передбачені робочою навчальною програмою дисципліни..

Критерії оцінювання письмового заліку

Білеті (закритого типу) складаються з 10 питань.

Далі наведений перелік питань:

1. Ітераційний метод. Метод Данилевського знаходження коефіцієнтів характеристичного рівняння.
2. Метод скалярних добутоків знаходження максимального власного значення симетричної матриці.
3. Метод теорії збурень в задачах знаходження власних значень та власних векторів.
4. Знаходження власних значень (методи Рітца, Бубнова-Гальоркіна, найменших квадратів).
5. Прямі та інтеграційні методи розв'язування систем лінійних рівнянь з повними матрицями та матрицями спеціального виду для динаміки класичних та квантових систем.
6. Методи спряжених градієнтів розв'язування лінійних систем і спектральних задач.
7. Чисельна інтерполяція та диференціювання.
8. Многочлени Лежандра і Чебишева; їх властивості та застосування.
9. Класичні ортогональні поліноми, поліноми Чебишева, Ерміта.
10. Елементи теорії гіпергеометричних функцій: визначення та властивості.
11. Рівняння Бесселя і циліндричні функції.
12. Поліноми Лежандра, приєднані поліноми Лежандра.
13. Інтегральні рівняння Фредгольма: Поглиблений розгляд. Резольвента Фредгольма.
14. Рівняння Вольтера: Поглиблений розгляд. Рівняння Вольтера з різницевидами ядрами. метод інтегральних перетворень.
15. Функція Гріна звичайного диференціального оператора. Аналітичні властивості функції Гріна.
16. Рівняння Гельмгольца і Шредінгера. Рівняння Гельмгольца в необмеженій області.
17. Рівняння математичної фізики у частинних похідних вищих порядків.
18. Варіаційне числення. Метод Гальоркіна і варіаційний метод у кінцево-елементному формулюванні
19. Метод Гальоркіна і варіаційний метод з використанням глобальних базисних функцій.
20. Метод колокацій. Метод моментів.
21. Метод теорії збурень у розв'язанні рівнянь з частинними похідними другого порядку.
22. Метод кінцевих елементів. Чисельні методи в задачах моделювання процесів теплообміну, конвекції, випромінювання, переносу енергії і маси.
23. Чисельні методи, використовувані в задачах моделювання турбулентності, регулярної та стохастичної динаміка та хаосу.

24. Моделі турбулентності різних порядків, теорії замикання. Чисельні рішення рівнянь які описують регулярну і стохастичну динаміку однієї багатовимірних систем.
25. Чисельні методи у фрактальній геометрії та теорії хаосу. Властивості фрактальних множин. Чисельні алгоритми обчислення спектру фрактальних розмірностей, топологічних та динамічних інваріантів класичних та квантових систем.
26. Метод вейвлет-розкладання та обчислення спектру фрактальних розмірностей. Чисельні методи моделювання явищ класичного та квантового хаосу в динаміці класичних та квантових систем.
27. РС Комплекс програм «Geomath».
28. Чисельні основи формалізму теорії збурень (для вироджених та невивражених станів). Секулярна теорія збурень.
29. Чисельні методи розв'язання рівнянь динаміки квантових систем (Шредінгера, Дірака, Клейна-Гордона-Фока). Чисельні алгоритми методів теорії самоузгодженого поля (Хартрі-Фока, Хартрі-Слетера, Х-метод, Дірака-Фока, Дірака-Кона-Шема).
30. Чисельні алгоритми наближених методів модельного потенціалу, квантового дефекту, Томаса-Фермі та функціонала густини. Релятивістське рівняння Дірака для електрона у зовнішньому полі.
31. Метод багаточастинкової теорії збурень з Хартрі-Фоківським (дірак-фоківським) нульовим наближенням.
32. Чисельні основи релятивістської (КЕД) багаточастинкової теорії збурень в задачах квантової геометрії, механіки, динаміки.
33. Теорія розв'язання рівнянь Хартрі-Фоку для електронів в атомах, молекулах, кристалах.
34. Алгебраїчна проблема власних значень для рівнянь динаміки квантових систем.
35. Обчислення інтегралів перекриття хвильових функцій, матричних елементи операторів кінетичної енергії, електронно-ядерної, електрон-електронної кулонівської та обмінної взаємодії.
36. Оптимізація нульового наближення теорії збурень та чисельна оцінка поправок вищих порядків. Калібрувальні-інваріантні схеми.
37. Математичні основи теорії міжелектронних кореляцій (ефекти поляризаційної взаємодії, екранувальні ефекти, ітерації масового оператора).
38. Функція Гріна рівняння Дірака з несингулярним потенціалом та комплексною енергією.

Правильна відповідь на кожне питання оцінюється у 10 балів від максимально можливої суми (100). **Загальна залікова оцінка** (бал успішності) у цьому випадку є арифметичною сумою оцінок за кожне питання.

Шкала оцінювання за системою ECTS та національною системою

За шкалою ECTS	За національною системою	Бал успішності
	Для заліку	
A	зараховано	90-100
B	зараховано	82-89,9
C	зараховано	74-81,9
D	зараховано	64-73,9
E	зараховано	60-63,9
FX	не зараховано	35-59,9
F	не зараховано	1-34,9

11. Література

Основна література

1. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
2. Тихонов В.С., Самарский А.А., Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1987.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1981.
4. Хатсон В., Пим Дж., Приложение функционального анализа и теории операторов.-М.:Мир, 1983.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. - М.: Наука, 1977.
6. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений М.: Наука,1972.
7. Glushkov A.V. , Khetselius O.Yu., Kruglyak Yu.A., Ternovsky V.B., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P.3 Lecture's Notes - Odessa: TEC, 2015.-180P.
8. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев:КНТ, 2006.
9. Глушков А.В., Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.-Одесса: Экология, 2008.
- 10.Хецелиус О.Ю., Квантовая структура электрослабого взаимодействия в тяжелых конечных ферми-системах. - Одесса: Экология, 2011.
- 11.Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецелиус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика . - Одеса: TEC, 2009.
- 12.Kruglyak Yu.A., Glushkov A.V., Prepelitsa G.P., Buyadzhi V.V., Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos theory, P. 4. - Odessa: TEC, 2015.-180P.
- 13.Glushkov A.V., Kruglyak Yu.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 1: Theory of many-body systems, Lecture's Notes.- Odessa: OSENU, 2015.-164P.
- 14.Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Serga I.N., Numerical methods in Quantum Geometry and Chaos theory, Part 2: New methods and algorithms, Lecture's Notes- Odessa: OSENU, 2015.- 130P.
- 15.Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Chernyakova Yu.G., Fractal Geometry and a Chaos Theory, part 2: New methods and algorithms of Nonlinear Analysis, Lecture's Notes- Odessa: OSENU.- 92P.
- 16.Глушков А.В., Новые методы математического моделирования в задачах конструктивной географии, гидрометеорологии и экологии.-Одесса: TEC.- 2014.-405С.

Додаткова література

1. Глушков О.В., Хецеліус О.Ю., Свинаренко А.А., Лобода А.В., Обчислювальні методи динаміки суцільних середовищ. Одеса: Екологія.-2007.
2. Хецеліус О.Ю., Прикладна математика.- Одеса: ТЕС.-2014.-102С.
3. Глушков О.В., Вітавецька Л.А., Хецеліус О.Ю., Лобода А.В., Флорко Т.О., «Математичне програмування».-Одеса, ОДЕКУ, 2011.-98С.
4. Глушков О.В., Сербов М.Г., Хецеліус О.Ю., Дубровська Ю.В., Флорко Т.О., Прикладна математика.- Одеса: Екологія.-2007
5. Glushkov A.V., Nonlinear chaotic dynamics of Quantum systems: Molecules in an electromagnetic field and laser systems/ Glushkov A.V., Buyadzhi V.V., Kvasikova A.S., Ignatenko A.V., Kuznetsova A.A., Prepelitsa G.P., Ternovsky V.B.//Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology. Series: Progress in Theoretical Chem.and Phys., Eds. A.Tadger, R.Pavlov, J.Marvani, E.Brändas, G.Delgado-Barrio (Springer).-2016-Vol.B30.-P.141-151.
6. Варенцова С.А., Волков А.Г., Трофимов В.А. Консервативная разностная схема для задачи распространения фемтосекундного лазерного импульса в кубично-нелинейной среде// Журнал вычисл. матем. и матем. Физики.-2003.-Т. 43,№11.-С. 1709-1721.
7. Попов В.А. Решение уравнений Хартри-Фока для электронов в кристалле // Журнал вычисл. матем. и матем. Физики.-1998.-Т.38,№6.-С. 978- 991.
8. Белоцерковский О.М. Прямое численное моделирование свободной развитой турбулентности // Журнал вычисл. матем. и матем. Физ.-1985. Т.25,№12.-С.1856-1882.
9. Белоцерковский О. М., Гуцин В.А., Коньшин В.Н. Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости со свободной поверхностью // Журнал вычисл. матем. и матем. Физики 1987.-27,№ 4.-С.594-609.
10. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Brusentseva S.V., Zaichko P.A., Ternovsky V.B., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology// Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering, Ed. J.Balicki.(Gdansk, WSEAS Pub.).-2014.-Vol.21.-P.69-75.
11. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Ternovsky V.B., Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process// Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering, Ed. J.Balicki.(Gdansk, WSEAS Pub.).-2014.-Vol.21.-P.143-150.