



## STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Skaitiniai fizikinės kinetikos modeliai	

Anotacija
Šis kursas skirtas fizikos krypties studentams, norintiems susipažinti su fizikinės kinetikos (nepusiausvyrinės statistinės fizikos) matematine teorija, modeliais ir sprendžiamais uždaviniais. Taip pat pristatomi minėtiems ir panašioms uždaviniams spręsti reikalingi stochastinių reiškinių skaitinio modeliavimo metodai, skiriamas dėmesys praktiniam metodų taikymui naudojant šiuolaikinius asmeninius bei aukšto našumo kompiuterius.

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: dr. Stepas Toliautas	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Antroji (magistrantūros studijos)	Pasirenkamasis

Įgyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Mišraus mokymosi	Rudens (1) semestras	Lietuvių, anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
<b>Išankstiniai reikalavimai:</b> tikimybių teorija, termodinamika, klasikinė statistinė fizika, matematinės fizikos metodai, teorinė ir kvantinė mechanika (bakalauro kursų lygio žinios); programavimo pagrindai; anglų k. (rekomenduojamas B2 dėl medžiagos turinio)	<b>Gretutiniai reikalavimai (jei yra):</b> nėra

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	140 val.	64	76

<b>Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos</b>		
Supažindinti su fizikinės kinetikos mokslo sąvokomis ir sprendžiamais uždaviniais. Pristatyti kinetinių reiškinių aprašymo matematinėmis lygtimis ypatumus, šioje srityje taikomus matematinės fizikos metodus. Supažindinti su stochastinių reiškinių skaitinio modeliavimo principais. Taikyti skaitinius modelius naudojant asmeninius ir našųjų skaičiavimų (HPC) resursus, vizualizuoti jų rezultatus.		
<b>Dalyko (modulio) studijų siekiniai</b>	<b>Studijų metodai</b>	<b>Vertinimo metodai</b>
Studentai žinos fizikinės kinetikos mokslo sąvokas, sprendžiamų uždavinių pobūdį ir pagrindinius rezultatus.	Aiškinamasis ir probleminis dėstymas Tikslinės informacijos paieška	Namų užduotys, seminaras, egzaminas
Studentai gebės nagrinėti fizikinės kinetikos uždavinius ir spręsti juos pasirinktais metodais naudodami šiuolaikinę skaičiavimų įrangą.	Aktyvus mokymasis: prižiūrimas ir savarankiškas užduočių sprendimas	Namų užduotys, egzaminas

<b>Temos</b>	<b>Kontaktinio darbo valandos</b>						<b>Savarankiškų studijų laikas ir užduotys</b>		
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	<b>Užduotys</b>
1. <b>Tikimybių teorijos pagrindai.</b> Įvykiai, jų tikimybės. Aibės. Skirstiniai. Statistiniai įverčiai. * Atsitiktinių skaičių su įvairiais skirstiniais generavimas ir taikymai.	4		4				8	8	
2. <b>Stochastiniai procesai.</b> Brauno dalelės modeliai. Spektrinė stochastinių procesų analizė. * Lanževano lygtis Brauno dalelei, jos analiziniai ir skaitiniai sprendiniai. * Našųjų skaičiavimų (HPC) pagrindai. Paskirstytieji skaičiavimai, grafiniai procesoriai.	6		4				10	10	
3. <b>Pernašos teorija.</b> Maksvelo ir Bolcmano skirstinys. Dujų slėgis. Lokalioji pusiausvyra ir lokalūs parametrai; susidūrimų dažnis, vidutinis laisvojo lėkio kelias. Savidifuzija. Šiluminis laidumas. Klampa. * Dalelių sistemų dvimatėje ir trimatėje erdvėje skaitinis modeliavimas, sistemos termodinaminių parametrų skaičiavimas. * Skaičiavimo kaštų įvertinimas ir optimizavimas.	6		8				14	14	

4. <b>Bolcmano kinetinė lygtis.</b> Pasiskirstymo funkcija. Tolydumo lygtis. Bolcmano lygtis be susidūrimų. Relaksacijos laiko aproksimacija. Bendroji tvermės lygtis. Tvermės lygtys, nulinės eilės hidrodinaminės lygtys. Pasiskirstymo funkcijos pirmos eilės pataisa. Šilumos srautas. Įtempių tenzorius. Pirmos eilės hidrodinaminės lygtys. Dalelių sklaida. Susidūrimų įskaitymas Bolcmano lygtyje. Bolcmano H teorema. Pusiausviras Bolcmano lygties sprendinys. * Dujų (CFD) ir gardelės ( <i>lattice</i> ) skaitiniai modeliai hidrodinaminėms lygtims spręsti. * Skysčių dinamikos skaičiavimų paketai.	12		12					24	24
5. <b>Chaos teorijos pradmenys.</b> Chaotinių reiškinių matematiniai pagrindai. * Chaotinių reiškinių vizualizavimas.	4		4					8	8
6. <b>Pasirengimas egzaminui.</b>									12
<b>Iš viso</b>	<b>32</b>		<b>32</b>					<b>64</b>	<b>76</b>

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
<b>Namų užduotys:</b> matematiniai uždaviniai, programų kodas	50	Semestro metu, sutartais terminais	<i>Kiekvienai užduočiai/ jos daliai, vertinamai 1 tašku:</i> atlikta teisingai ir/arba veikia – 1 taškas, veikia ne visais atvejais arba yra klaidų – 0,5 taško, atlikta teisingai ir/arba neveikia – 0 taškų. Įvertinimas yra atskirų užduočių taškų suma.
<b>Seminaras:</b> pasirinktos temos pristatymas	20	Semestro metu	<i>Pristatymas:</i> aiškiai – 2 taškai, silpnai/ neatsakoma į klausimus – 1 taškas, neatsiskaityta – 0 taškų.
<b>Egzaminas:</b> klausimai raštu ir jų aptarimas	30	Sesijos metu	Egzaminą sudaro atviro tipo klausimai ir užduotys. Įvertinimas yra teisingai atliktų užduočių dalis.

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
<b>Rekomenduojama literatūra</b>				
R. Soto	2016	Kinetic Theory and Transport Phenomena		Oxford University Press (New York)
T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E.M. Viggien	2017	The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice		Springer International (Switzerland)
<b>Papildoma literatūra</b>				
P. Pacheco, M. Malensek	2022	An Introduction to Parallel Programming, 2 <sup>nd</sup> Ed.		Morgan Kaufmann (Cambridge, MA)



## COURSE UNIT DESCRIPTION

Course unit title	Code
Numerical models of physical kinetics	

Annotation
<p>This course is aimed at students that seek to familiarize themselves with the concepts of mathematical theory of physical kinetics (non-equilibrium statistical physics), the models based on it and the range of applicable problems. Numerical methods and techniques for computing properties of stochastic processes described by these and similar models will be presented, with focus on practical implementation using personal and high-performance computing (HPC) technology.</p>

Lecturer(s)	Department, Faculty
<b>Coordinating:</b> Dr. Stepas Toliautas	

Study cycle	Type of the course unit
Second cycle (masters studies)	Elective

Mode of delivery	Semester or period when it is delivered	Language of instruction
Mixed (on-site and online)	Autumn (1st) semester	Lithuanian, English

Requisites	
<p><b>Prerequisites:</b> probability theory, thermodynamics, classical statistical physics, equations of mathematical physics, theoretical and quantum mechanics (bachelor level); programming basics; English (B2 recommended)</p>	<p><b>Co-requisites (if relevant):</b> none</p>

Number of ECTS credits allocated	Student's workload (total)	Contact hours	Individual work
5	140 hrs.	64	76

<b>Purpose of the course unit: programme competences to be developed</b>		
To introduce the concepts and postulated problems of physical kinetics. To overview mathematical description of kinetic phenomena, relevant analytical and numerical techniques for solving problems in near-equilibrium stochastic systems. To apply numerical models to solve problems of physical kinetics using personal and high-performance computing (HPC) resources, to decide on and perform results visualization.		
<b>Learning outcomes of the course unit</b>	<b>Teaching and learning methods</b>	<b>Assessment methods</b>
Students will learn the concepts, problems and main findings in the field of physical kinetics.	Lectures and case studies Exercises, problem solving	Home assignments, group presentation, exam
Students are expected to analyze typical problems in physical kinetics, to choose and implement suitable approximations for modeling of kinetic phenomena, to evaluate chosen models using modern scientific computing technology.	Guided and independent problem solving	Home assignments

<b>Course content: breakdown of the topics</b>	<b>Contact hours</b>						<b>Individual work: time and assignments</b>		
	Lectures	Tutorials	Seminars	Workshops	Laboratory work	Internship/work placement	Contact hours	Individual work	Assignments
1. <b>Probability theory basics.</b> Random events, probabilities. Sets. Distributions, statistical estimates. * Random-number generation and application with desired statistical distributions.	4		4				8	8	Home assignments, group presentation on a selected topic
2. <b>Stochastic processes.</b> Models of Brownian motion. Harmonic analysis of stochastic processes. * Langevin equation for the Brownian particle, its analytic and numerical solutions. * Basic concepts of high-performance computing. Parallel computations, graphical processing units.	6		4				10	10	
3. <b>Transport theory.</b> Maxwell-Boltzmann distribution. Gas pressure. Local equilibrium, local quantities; collision frequency, mean free path. Self-diffusion. Thermal conductivity. Viscosity. * Numerical modeling of 2D and 3D particle systems, estimation of thermodynamic parameters. * Estimation and optimization of computing costs.	6		8				14	14	

4. <b>Boltzmann's kinetic equation.</b> Distribution function. Continuity equation. Collision-free Boltzmann equation. Relaxation time approximation. Conservation equations. Zeroth-order hydrodynamic equations. First-order corrections to the distribution function. Heat flow. First-order hydrodynamic equations. Scattering. Collision terms in Boltzmann equation. Boltzmann H-theorem. Equilibrium solution of Boltzmann equation. * Fluid- and lattice-based computational models for solving hydrodynamic equations. * Scientific software packages of fluid dynamics.	12		12					24	24
5. <b>Chaos theory basics.</b> Mathematical concepts of chaotic processes. * Visualization of chaotic processes.	4		4					8	8
6. <b>Course review before examination.</b>									12
<b>Total</b>	<b>32</b>		<b>32</b>					<b>64</b>	<b>76</b>

Assessment strategy	Weight, %	Deadline	Assessment criteria
<b>Home assignments:</b> math and coding exercises	50	Lecture period, based on set schedule	<i>For each partial exercise worth 1 point:</i> correct solution – 1 point, partial solution – 0,5 point, incorrect/ no solution – 0 points. Final grade is a sum of all exercise grades.
<b>Group presentation</b> of a selected topic	20	Lecture period	<i>Presentation:</i> clear – 2 points, weak / unable to discuss the topic further – 1 point, not done – 0 points.
<b>Written exam</b>	30	Exam period	Open questions and exercises. Exam grade is a ratio of correctly solved tasks.

Author	Publishing year	Title	Edition, issue or volume no.; required pages	Publishing house or internet site
<b>Recommended reading</b>				
R. Soto	2016	Kinetic Theory and Transport Phenomena		Oxford University Press (New York)
T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E.M. Viggien	2017	The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice		Springer International (Switzerland)
<b>Additional reading</b>				
P. Pacheco, M. Malensek	2022	An Introduction to Parallel Programming, 2 <sup>nd</sup> Ed.		Morgan Kaufmann (Cambridge, MA)