

ОПИС/Сілабус дисципліни/модуля

Коротка назва університету / підрозділу дата (місяць / рік)	НУ «Запорізька політехніка» 08/2020
Назва модулю / дисципліни	Комп'ютерне моделювання мультифізичних систем.
Код:	КММФС

Викладачі	Підрозділ університету
Корніч Григорій Володимирович	Кафедра системного аналізу та обчислювальної математики

Рівень навчання (ВА/МА)	Рівень модулю/дисципліни (номер семестру)	Тип модулю/дисципліни (обов'язковий / вибірковий)
Перший (бакалаврський)	6	Вибірковий

Форма навчання (лекції / лабораторні / практичні)	Тривалість (тижнів/місяців)	Мова викладання
лекції / практичні / лабораторні	14	Українська

Зв'язок з іншими дисциплінами	
Попередні: – Математичні основи та методи системного аналізу, чисельні методи, загальна фізика;	Супутні (якщо потрібно): –

ECTS (Кредити модуля)	Загальна кількість годин	Аудиторні години	Самостійна робота
3,5	105	42	63
Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)			
➤ Формування у студентів уявлень про складні системи, у яких процеси йдуть з різною швидкістю та мають різні характерні часи і розміри. Розпилення поверхні, каскади зіткнень, іонне масоперенесення. Основне рівняння класичної динаміки, а саме рівняння Лагранжа та його вивід. Здобуття рівняння Ньютона з рівняння Лагранжа. Застосування класичних рівнянь руху для опису динаміки атомів у твердих тілах. Достовірність класичного наближення. ➤ Транспортне рівняння масоперенесення з колективною складовою. Дифузійне наближення. Розпилення поверхні, що бомбардується. Чисельне розв'язання рівнянь масоперенесення. ➤ Двокрокове моделювання масоперенесення: об'єднання методу молекулярної динаміки з континуальним представленням середовища моделювання. Різні способи об'єднання. Характерні часи та розміри модельних уявлень каскадів зіткнень і перемішування.			
Результати навчання в термінах компетенцій	Методи навчання (теорія, лабораторні, практичні)	Контроль якості (письмовий екзамen, усний екзамен)	

		мен, звіт)
– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою; – здатність генерувати нові ідеї (креативність), самостійно здобувати за допомогою інформаційних технологій і використовувати в практичній діяльності нові знання і вміння, в тому числі в нових галузях знань, безпосередньо пов'язаних з атомно-дискретним та континуальним методами моделювання; – здатність виконувати аналітичні викладки у межах класичної механіки та континуальних рівнянь масо перенесення, а також користуватися обчислювальними математичними методами у галузі професійної діяльності, ефективно розв'язувати задачі та поставленні завдання; – здатність використовувати динамічний підхід та підхід, заснований на континуальних рівняннях масо перенесення, для розв'язання поставлених задач.	Використання при проведенні лекцій та практичних занять Теоретичні знання, отриманні під час лекцій та консультацій Самостійна та під керівництвом викладача рішення задач Самостійна та під керівництвом викладача рішення задач	Окремого оцінювання не передбачено Окреме оцінювання не проводиться Оцінюються під час модульного контролю та отримання заліку Оцінюються під час модульного контролю та отримання заліку

Теми курсу	Аудиторні заняття						Час та завдання на самостійну роботу	
	Лекцій	Консультацій	Семінарів	Практичні заняття	Лабораторні роботи	Загалом, годин	Самостійна робота	Завдання
Вступ. Тема 1. Системи та процеси з різними швидкостями, часами та розмірами. Розпилення поверхні, каскади зіткнень атомів, іонне масоперенесення.	2			2	4	18	10	Лабораторна робота та розв'язання задач
Тема 2. Рівняння руху. Принцип найменшої дії, принцип відносності Галілея. Функція та рівняння Лагранжа, рівняння Ньютона. Опис каскадів атомних зіткнень рівняннями Ньютона. Потен-	2			2	6	20	10	Лабораторна робота та розв'язання задач

ціали міжатомної взаємодії. Достовірність класичного наближення.								
Тема 3. Закони збереження. Центр інерції.	2			2		16	12	Розв'язання задач
Тема 4. Моделювання атомних зіткнувальних каскадів у рамках методу класичної молекулярної динаміки.	2			2		12	8	Розв'язання задач
Тема 5. Транспортне рівняння іонного перемішування з колективним членом та його дифузійне наближення. Граничні умови з урахуванням розпилення поверхні, що бомбардується іонним пучком. Чисельне розв'язання континуальних рівнянь: різні обчислювальні схеми.	2			2	4	20	12	Лабораторна робота та розв'язання задач
Тема 6. Сумісне розв'язання континуальних рівнянь масоперенесення та молекулярно-динамічної моделі атомних каскадів зіткнень. Програмні коди сумісного розв'язання.	4			4		19	11	Розв'язання задач
Усього годин	14			14	14	105	63	

Стратегія оцінювання	Вага, %	Термін	Критерії оцінювання
Модульна контрольна робота	65	впродовж семестру	Письмове опитування
Виконання лабораторних робіт	5		Лабораторна робота з теми 1
	6		Лабораторна робота з теми 2
	6		Лабораторна робота з теми 5
	6		Практичне завдання з теми 1 і 4
	6		Практичне завдання з теми 2 і 3
	6		Практичне завдання з теми 5 і 6
Залік в кінці семестру			

Автори	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / он-лайн доступ
Обов'язкова література				
Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц	1988	Теоретическая физика. Т1. Механика.	Навчальний посібник	Москва: Наука, Глав. Ред. Физ.-Мат. Лит. 1988. – 216 с.
Г.В. Корніч	2019	Поверхня твердого тіла при бомбарду-	Монографія	Запоріжжя: Національний університет

		ванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи.		“Запорізька політехніка” – 2019.- 302 с. ISBN 978-617-529-240-2
Г.В.Корніч, Н.І. Біла, А.І. Денисенко, О.О. Подковаліхіна	2015	Чисельний аналіз систем з розподіленими параметрами інструментами MATLAB	Навчальний посібник	Запоріжжя, Вид. “Кругозор”, 2015. – 128 с. ISBN 978-966-2602-91-III
Укл.: Г.В. Корніч, О.В. Кривцун, О.О.Подковаліхіна, Д.В.Ширококорд.	2019	Методи теоретичної фізики. Механіка	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 58 с.
Укл.: Г.В. Корніч, О.В. Кривцун, О.О.Подковаліхіна, Д.В.Ширококорд.	2019	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 18 с.
Додаткова література				
Р. Бериш, П. Зигмунд, М. Робинсон, Х. Андерсен, Х. Бай, Х. Розендал	1984	Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I.	Тематический сборник статей	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва: Мир.- 1984. – 336 с.
Р. Бериш, Г. Бетц, Г. Венер, та ін.	1986	Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II.	Тематический сборник статей	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- М: Мир.- 1986. – 486 с.
В. Экштайн	1995	Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела	Монография	Пер. с англ.- Москва: Мир.- 1995.- 320 с.
J.M. Haile	1992	Molecular dynamics simulation - elementary methods	Учебное пособие	New York: Wiley-Interscience.- 1992.- 386 p.
Дуда Е.В., Корніч Г.В.	2020	Моделирование диффузии вакансии в кристалле методом температурно-ускоренной динамики	Періодичний журнал	Металлофизика и Новейшие Технологии.- 42(3) 2020 323-332. (И-т металлофизики им. Г.В. Курдюмова, НАН Украины) https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0323 .
Duda E.V., Kornich G.V.	2019	On the Combination of Methods of Temperature-Accelerated Dynamics and Hyperdynamics	Періодичний журнал, вид. Springer	Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.- V.13(4) – 2019.- 667-669. (Изд.Springer). http://doi.org/10.1134/S1027451019030066