

ОПИС/Сілабус дисципліни/модуля

Коротка назва університету / підрозділу дата (місяць / рік)	НУ «Запорізька політехніка» 08/2020
Назва модулю / дисципліни	Системний аналіз технічних та природничих систем
Код:	CATPC

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)
Другий (магістрський)	1	Вибірковий

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

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

ECTS (Кредити модуля)	Загальна кількість годин	Аудиторні години	Самостійна робота
4.5	135	45	90

Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)			
➤ Формування у студентів уявлень про побудову моделей і роль якісної моделі у висновках системних досліджень. Сучасні методи моделювання та аналізу модельних атомних систем. ➤ Атомно-дискретні ймовірнісні методи; атомно-дискретні методи молекулярної динаміки, що засновані на класичних рівняннях руху атомів, континуальні моделі масоперенесення на основі систем диференціальних рівнянь. Використання спеціальних нейронних мереж. ➤ Методи моделювання системи “Зовнішня атомна частинка-поверхня твердого тіла”, основні уявлення та параметри теорії зіткнувальних каскадів атомів, відповідне використання нейронних мереж. ➤ Моделювання атомних нанокластерів та утворення тонких плівок. Переваги та недоліки різних методів моделювання. Ідентифікація та відокремлення фізичних механізмів шляхом використання кластерного аналізу результатів моделювання. ➤ Системний аналіз та вибір додаткових актуальних параметрів атомних систем у прискорених методах молекулярної динаміки, масштабування модельного часу.			

Результати навчання в термінах компетенцій	Методи навчання (теорія, лабораторні, практичні)	Контроль якості (письмовий екзамen, усний екзамen, звіт)
– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою; – здатність генерувати нові ідеї, самостійно здобувати за допомогою інформаційних технологій і використовувати в практичній діяльності нові знання, безпосередньо пов'язані з методами моделювання та аналізу нанорозмірних об'єктів; – здатність виконувати аналітичні викладки, чисельні розрахунки та програмування окремих фрагментів цих методів у галузі професійної діяльності, ефективно розв'язувати задачі та поставленні завдання; – здатність використовувати системний підхід, для розв'язання поставлених задач.	Використання у лекціях та лаб. заняттях Теоретичні знання, отриманні під час лекції та консультацій Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач Самостійне та під керівництвом викладача моделювання та аналіз	Окремого оцінювання не передбачено Окреме оцінювання не проводиться Оцінюються під час модульного контролю та екзамену Оцінюються під час модульного контролю та екзамену

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. Нанорозмірні системи. Сутність моделювання. Континуальне та атомно-дискретне моделювання. Макро- та мікропідходи до моделювання. Переваги та недоліки континуального та атомно-дискретного підходів, комбінований підхід. Поняття “чорної скрині”.	2					11	9	
Тема 2. Дифузійноподібні та інтегро-диференціальні транспортні рівняння масоперенесення, метод “колективних потоків”, граничний перехід від транспортного до дифузійного рівняння при малих стриб-	2					11	9	

ках атомів у порівнянні з характерними розмірами задачі. Поняття математичного моделювання.								
Тема 3. Атомно-дискретне моделювання: методи Монте Карло, метод молекулярної динаміки. Переваги та недоліки цих методів, межі їх застосування у парадигмі мікроскопічного моделювання.	2					11	9	
Тема 4. Основи теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів. Пружні та непружні втрати енергії первинних бомбардуючих частинок у мішені. Коефіцієнти розпилення та відбиття.	4					13	9	
Тема 5. Континуальні рівняння масоперенесення. Іонне перемішування, дифузія по вакансіям та міжвузловим атомам. Прямий та зворотній ефекти Кіркендала. Розмірні дефекти.	2				4	15	9	Лабораторна робота 1
Тема 6. Динамічний метод Монте Карло, моделювання термічно-активованих процесів методом Монте Карло.	2				4	15	9	Лабораторна робота 2
Тема 7. Метод класичної молекулярної динаміки. Парні та багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Потенціали притягання та відштовхування. Спеціальні нейронні мережі. Чисельні методи та умови розв'язання рівнянь руху атомів.	4					13	9	
Тема 8. Метод класичної молекулярної динаміки (продовження). Періодичні граничні умови та термостати. Моделювання температурних кристалів. Прискорення обчислень завдяки списку "найближчих сусідів".	2				6	17	9	Лабораторна робота 3
Тема 9. Моделювання атомних кластерів та тонких плівок. Континуальний та атомно-дискретні підходи. Кластерний аналіз та ідентифіка-	4					13	9	

ція фізичних механізмів.								
Тема 10. Поняття прискорених методів молекулярної динаміки та їх актуальність. Засоби температурного прискорення та гіпердинаміки. Масштабування модельного часу.	4	3				16	9	
Усього годин	28	3			14	135	90	

Стратегія оцінювання	Вага, %	Термін	Критерії оцінювання
Модульна конт. робота	65	впродовж семестру	Письмове опитування
Виконання лабораторних робіт	15		Лабораторна робота з тем 1-5
	10		Лабораторна робота з теми 6
	10		Лабораторна робота з тем 7-8
Складання екзамену	90 – 100	після модулю	відмінно
	85-89		добре
	75-84		
	70-74		задовільно
	60-69		
	35-59		незадовільно з можливістю повторного складання
	0-34		незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

Автор	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / он-лайн доступ
Обов'язкова література				
Г.В. Корніч	2019	Поверхня твердого тіла при бомбардуванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи.	Монографія	Запоріжжя: Національний університет “Запорізька політехніка” – 2019.- 302 с. ISBN 978-617-529-240-2
В.Г. Дубровский	2009	Теория формирования эпитаксиальных наноструктур	Монографія	М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.- 352 с. ISBN 978-5-9221-1069-3
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	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 18 с.
Додаткова література				
Р. Бериш, П. Зиг-	1984	Распыление твердых	Темати-	Пер. с англ./ Под ред.

мунд, М.Робинсон, Х.Андерсен та ін.		тел ионной бомбардировкой. Выпуск I.	ческий сборник	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	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва: 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.1992-386p.
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2020	Evolution of the Ni-Al Janus-like clusters under the impacts of low-energy Ar and Ar13 projectiles	Період. журнал, Вид. Elsevier	Materials Today Com.- 23 101107-12. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101107
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2019	Formation of the core-shell structures from bimetallic Janus-like nanoclusters under low-energy Ar and Ar13 impacts: MD study	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Computational Materials Science.- 159(3) 2019 110-119. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002
Shyrokorad D.V., Kornich G.V.	2016	A Neural Network Method for Restoring the Initial Impurity Concentration Distribution from Data of Ion Sputter Depth Profiling	Періодичний журнал, Вид. Springer	Technical Physics Letters.- 42(7) – 2016.- 720-722. http://doi.org/10.1134/S1063785016070282
Дуда Е.В., Корнич Г.В.	2020	Моделирование диффузии вакансий в кристалле методом температурно-ускоренной динамики	Вид. Ін-т металлофізики Г.В.Курдюмова	Металлофізика и Новейшие Технологии.- 42(3) 2020 323-332. 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	J. Surf. Invest.: X-ray, Synch. Neut. Tech.- 13(4) – 2019.- 667-669. http://doi.org/10.1134/S1027451019030066
Duda E.V., Kornich G.V.	2017	Method for construction of a biased potential for hyperdynamic simulation of atomic systems	Періодичний журнал, Вид. Springer	Physics of the Solid State.- 59(10) – 2017.- 1900-1905. http://doi.org/10.1134/S1063783417100134
Ширококорад Д.В., Корнич Г.В.	2017	Моделирование столкновительной стадии эволюции двудольных биметаллических кластеров под действием димеров аргона низких энергий	Період. журнал, Вид. Ін-т металлофізики ім. Г.В. Курдюмова	Металлофізика и Новейшие Технологии.- Т.39(2)- 2017.- 163-175. http://doi.org/10.15407/mfint.39.02.0163