

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. Загальна структура та взаємний зв'язок методів моделювання наносистем. ➤ Методи моделювання системи “Зовнішня атомна частинка-поверхня твердого тіла”, основні уявлення та параметри теорії зіткнувальних каскадів атомів. Проблема використання штучних нейронних мереж для опису атомних зіткнень. ➤ Моделювання плоских кристалічних поверхонь, атомних нанокластерів та утворення тонких плівок. Переваги та недоліки різних методів моделювання. Ідентифікація та відокремлення модельних механізмів шляхом використання кластерного аналізу великих об'ємів числових результатів моделювання, ідентифікація структури результуючих даних.			

➤ Вибір додаткових актуальних параметрів атомних систем у прискорених методах молекулярної динаміки, масштабування модельного часу. ➤ Розуміння універсальності, альтернативності і адаптивності методів моделювання по відношенню до систем різної природи.		
Результати навчання в термінах компетенцій	Методи навчання (теорія, лабораторні, практичні)	Контроль якості (письмовий екзамен, усний екзамен, 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, уявляти структурний взаємозв'язок цих методів; – здатність виконувати аналітичні викладки, чисельні розрахунки та програмування окремих фрагментів цих методів у галузі професійної діяльності, ефективно розв'язувати задачі та поставленні завдання, системно аналізувати здобуті результати; – здатність використовувати системний підхід, для розв'язання поставлених задач; – використовувати універсальність, адаптивність і можливість застосування засвоєних методів моделювання наносистем для розв'язання задач іншої природи.	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 Самостійне та під керівництвом викладача моделювання та аналіз	Окремого оцінювання не передбачено Окреме оцінювання не проводиться Оцінюються під час модульного контролю та екзамену Окреме оцінювання не проводиться Окреме оцінювання не проводиться

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, їх універсальність, комбінований підхід, їх структуризація. Системна ієрархія методів моделювання наносистем.	2					11	9	
Тема 2. Дифузійноподібні та інтегро-диференціальні транспортні рівняння масоперенесення, метод “колективних потоків” та його універсальність, граничний перехід від транспортного до дифузійного рівняння. Застосування рівнянь масоперенесення до задач різної природи. Поняття комп’ютерного моделювання.	2					11	9	
Тема 3. Атомно-дискретне моделювання: методи Монте Карло, метод молекулярної динаміки. Переваги та недоліки цих методів, межі їх застосування у парадигмі наноскопічного моделювання.	2					11	9	
Тема 4. Основи теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів. Поняття “лінійності”, та його використання. Пружні та непружні втрати енергії первинних бомбардуючих частинок у мішені. Коефіцієнти розпилення та відбиття. Структуризація результатів, кластерний аналіз та інші методи, ідентифікація плям Венери. Штучні нейронні мережі для опису елементарних зіткнень атомів.	4					13	9	
Тема 5. Континуальні рівняння масоперенесення. Іонне перемішування, дифузія по вакансіям та міжвузловим атомам. Прямий та зворотній	2				4	15	9	Лабораторна робота 1

ефекти Кіркендала. Розмірні дефекти. Іонний пошаровий аналіз та проблема його зворотної задачі.								
Тема 6. Динамічний метод Монте Карло, моделювання термічно-активованих процесів методом Монте Карло. Застосування методу МК до задач іншої природи.	2				4	15	9	Лабораторна робота 2
Тема 7. Метод класичної молекулярної динаміки. Парні та багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Потенціали притягання та відштовхування. Використання спеціальних штучних нейронних мереж. Чисельні методи та умови розв'язання рівнянь руху атомів.	4					13	9	
Тема 8. Метод класичної молекулярної динаміки (продовження). Періодичні граничні умови та кібернетичні термостати. Моделювання температурних кристалів. Прискорення обчислень завдяки списку "найближчих сусідів".	2				6	17	9	Лабораторна робота 3
Тема 9. Моделювання плоских поверхонь, атомних кластерів та тонких плівок. Континуальний та атомно-дискретні підходи. Кластерний аналіз, структура результатів та ідентифікація механізмів розсіювання на поверхневих кластерах.	4					13	9	
Тема 10. Поняття прискорених методів молекулярної динаміки та їх актуальність. Засоби температурного прискорення та гіпердинаміки. Масштабування модельного часу. Обговорення загальних підходів до ускладнення моделей на прикладі прискорених динамічних методів.	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. Зигмунд, М.Робинсон, Х.Андерсен та ін.	1984	Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I.	Тематический сборник	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	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	Учебное пособие	New York: Wiley-Interscience.1992-386p.

		methods		
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. Ин-т металлофизики Г.В.Курдюмова	Металлофизика 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. Ин-т металлофизики ім. Г.В. Курдюмова	Металлофизика и Новейшие Технологии.- Т.39(2)- 2017.- 163-175. http://doi.org/10.15407/mfint.39.02.0163