

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 / вибірко- вий)
Перший (бакалаврський)	6	Вибірковий

Форма навчання (лекції / лабораторні / практичні)	Тривалість (тижнів/місяців)	Мова викладання
лекції / практичні / лабора- торні	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
4,5	135	42	90

Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)		
<ul style="list-style-type: none"> ➤ 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 Ньютонів 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 екзамен, усний екза-

		мен, звіт)
<p>– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою;</p> <p>– 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;</p> <p>– 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;</p> <p>– здатність використовувати динамічний підхід та підхід, заснований на континуальних рівняннях масо перенесення, для розв'язання поставлених задач.</p>	<p>Використання при проведенні лекцій та практичних занять</p> <p>Теоретичні знання, отриманні під час лекції та консультацій</p> <p>Самостійна та під керівництвом викладача рішення задач</p> <p>Самостійна та під керівництвом викладача рішення задач</p>	<p>Окремого оцінювання не передбачено</p> <p>Окреме оцінювання не проводиться</p> <p>Оцінюються під час модульного контролю та отримання заліку</p> <p>Оцінюються під час модульного контролю та отримання заліку</p>

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	30	20	Лабораторна робота та розв'язання задач

ціали міжатомної взаємодії. Достовірність класичного наближення.								
Тема 3. Закони збереження. Центр інерції.	2			2		23	19	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 переміщення 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	3		4		32	21	Розв'язання задач
Усього годин	14	3		14	14	135	90	

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.Широкоград.	2019	Методи теоретичної фізики. Механіка	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 58 с.
Укл.: Г.В. Корніч, О.В. Кривцун, О.О.Подковаліхіна, Д.В.Широкоград.	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