

### ОПИС/Сілабус дисципліни/модуля

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

<b>Викладачі</b>	<b>Підрозділ університету</b>
Корніч Григорій Володимирович	Кафедра системного аналізу та обчислювальної математики

<b>Рівень навчання (ВА/МА)</b>	<b>Рівень модулю/дисципліни (номер семестру)</b>	<b>Тип модулю/дисципліни (обов'язковий / вибірковий)</b>
Другий (магістрський)	1	Вибірковий

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

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

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

<b>Мета навчання дисципліни (модуля): компетенції надбані внаслідок вивчення дисципліни (модуля)</b>		
<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ Формування у студентів уявлень про побудову моделей і роль якісної моделі у висновках системних досліджень. Сучасні методи моделювання та аналізу модельних атомних систем.</li> <li>➤ Атомно-дискретні ймовірнісні методи; атомно-дискретні методи молекулярної динаміки, що засновані на класичних рівняннях руху атомів, континуальні моделі масоперенесення на основі систем диференціальних рівнянь.</li> <li>➤ Методи моделювання системи “Зовнішня атомна частинка-поверхня твердого тіла”, основні уявлення та параметри теорії зіткнувальних каскадів атомів.</li> <li>➤ Моделювання атомних нанокластерів та утворення тонких плівок. Переваги та недоліки різних методів моделювання. Ідентифікація та відокремлення фізичних механізмів шляхом використання кластерного аналізу результатів моделювання.</li> <li>➤ Системний аналіз та вибір додаткових актуальних параметрів атомних систем у прискорених методах молекулярної динаміки.</li> </ul>		
<b>Результати навчання в термінах компетенцій</b>	<b>Методи навчання (теорія, лаборатор-</b>	<b>Контроль якості (письмовий экза-</b>

	<b>рні, практичні)</b>	<b>мен, усний екзамен, звіт)</b>
<p>– вільно володіти державною мовою та спілкуватися іноземною мовою;</p> <p>– 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;</p> <p>– здатність виконувати аналітичні викладки, чисельні розрахунки та програмування окремих фрагментів цих методів у галузі професійної діяльності, ефективно розв'язувати задачі та поставленні завдання;</p> <p>– здатність використовувати системний підхід, для розв'язання поставлених задач.</p>	<p>Використання у лекціях та лаб. заняттях</p> <p>Теоретичні знання, отриманні під час лекції та консультацій</p> <p>Самостійне та під керівництвом викладача рішення задач</p> <p>Самостійне та під керівництвом викладача моделювання та аналіз</p>	<p>Окремого оцінювання не передбачено</p> <p>Окреме оцінювання не проводиться</p> <p>Оцінюються під час модульного контролю та екзамену</p> <p>Оцінюються під час модульного контролю та екзамену</p>

<b>Теми курсу</b>	<b>Аудиторні заняття</b>						<b>Час та завдання на самостійну роботу</b>	
	<b>Лекцій</b>	<b>Консультацій</b>	<b>Семінарів</b>	<b>Практичні заняття</b>	<b>Лабораторні роботи</b>	<b>Загалом, годин</b>	<b>Самостійна робота</b>	<b>Завдання</b>
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 токів”, граничний перехід від транспортного до дифузійного рівняння при малих стрибках атомів у порівнянні з ха-	2					11	9	

рактерними 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					<b>11</b>	<b>9</b>	
Тема 4. Основи теорії лінійних зіткнувальних каскадів атомів. Пружні та непружні втрати енергії первинних бомбардуючих частинок у мішені. Коефіцієнти розпилення та відбиття.	4					<b>13</b>	<b>9</b>	
Тема 5. Континуальні рівняння масоперенесення. Іонне перемішування, дифузія по вакансіям та міжвузловим атомам. Прямий та зворотній ефекти Кіркендала. Розмірні дефекти.	2				4	<b>15</b>	<b>9</b>	Лабораторна робота 1
Тема 6. Динамічний метод Монте Карло, моделювання термічно-активованих процесів методом Монте Карло.	2				4	<b>15</b>	<b>9</b>	Лабораторна робота 2
Тема 7. Метод класичної молекулярної динаміки. Парні та багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Потенціали притягання та відштовхування. Чисельні методи та умови розв'язання рівнянь руху атомів.	4					<b>13</b>	<b>9</b>	
Тема 8. Метод класичної молекулярної динаміки (продовження). Періодичні граничні умови та термостати. Моделювання температурних кристалів. Прискорення обчислень завдяки списку "найближчих сусідів".	2				6	<b>17</b>	<b>9</b>	Лабораторна робота 3
Тема 9. Моделювання атомних кластерів та тонких плівок. Континуальний та атомно-дискретні підходи. Кластерний аналіз та ідентифікація фізичних механізмів.	4					<b>13</b>	<b>9</b>	
Тема 10. Поняття прискоре-	4	3				<b>16</b>	<b>9</b>	

них методів молекулярної динаміки та їх актуальність. Засоби температурного прискорення та гіпердинаміки.								
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		незадовільно з можливістю повторного складання
	35-59		незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни
	0-34		

Автор	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / онлайн доступ
<b>Обов'язкова література</b>				
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.Широкоград.	2019	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 18 с.
<b>Додаткова література</b>				
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.	Тематический	Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва:

		ровкой. Выпуск II.	сборник	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.1992-386р.
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	Период. журнал, Вид. Elsevier	Materials Today Com.- 23 101107-12. <a href="https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101107">https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101107</a>
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	Периодический журнал, Вид. Elsevier	Computational Materials Science.- 159(3) 2019 110-119. <a href="https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002">https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002</a>
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	Периодический журнал, Вид. Springer	Technical Physics Letters.- 42(7) – 2016.- 720-722. <a href="http://doi.org/10.1134/S1063785016070282">http://doi.org/10.1134/S1063785016070282</a>
Дуда Е.В., Корнич Г.В.	2020	Моделирование диффузии вакансии в кристалле методом температурно-ускоренной динамики	Пер. жур., Вид. Ин-т металлофизики Г.В.Курдюмова	Металлофизика и Новейшие Технологии.- 42(3) 2020 323-332. <a href="https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0323">https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0323</a>
Duda E.V., Kornich G.V.	2019	On the Combination of Methods of Temperature-Accelerated Dynamics and Hyperdynamics	Периодический журнал, Вид. Springer	J. Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.- 13(4) – 2019.- 667-669. <a href="http://doi.org/10.1134/S1027451019030066">http://doi.org/10.1134/S1027451019030066</a>
Duda E.V., Kornich G.V.	2017	Method for construction of a biased potential for hyperdynamic simulation of atomic systems	Периодический журнал, Вид. Springer	Physics of the Solid State.- 59(10) – 2017.- 1900-1905. <a href="http://doi.org/10.1134/S1063783417100134">http://doi.org/10.1134/S1063783417100134</a>
Ширококорад Д.В., Корнич Г.В.	2017	Моделирование столкновительной стадии эволюции двудольных биметаллических кластеров под действием димеров аргона низких энергий	Период. журнал, Вид. Ин-т металлофизики ім. Г.В. Курдюмова	Металлофизика и Новейшие Технологии.- Т.39(2)- 2017.- 163-175. <a href="http://doi.org/10.15407/mfint.39.02.0163">http://doi.org/10.15407/mfint.39.02.0163</a>