

ОПИС/Силабус дисципліни/модуля

Коротка назва університету / підрозділу дата (місяць / рік)	НУ «Запорізька політехніка» 08/2021
Назва модулю / дисципліни	Комп'ютерне моделювання мультифізичних систем.
Код:	КММФС

Існує багато прикладів, коли еволюція складної системи відбувається завдяки декільком механізмам з характерними проміжками часу і простору, які критично відрізняються між собою. Наприклад, епідемії захворювань можуть розглядатися на рівнях захворювання однієї особи і/або розповсюдження у середовищі між особами. Протягом останніх 15 років активно розвивається *мультимасштабне моделювання*, яке розглядає разом декілька процесів еволюції складної системи, що мають критично різні величини параметрів і навіть різну природу.

В дисципліні на прикладі бомбардування твердого тіла іонами розглянуто масоперенесення через механізми зіткнувальних каскадів атомів з характерним часом 10^{-12} с і відстанню 10^{-9} м (10^2 - 10^4 атомів), а також іонного перемішування з характерним часом 1.0 с і відстанню 10^{-7} м. Зіткнувальні каскади моделюються методом молекулярної динаміки (МД), а іонне перемішування - континуальними рівняннями з параметрами, обчисленими МД методом. Така комбінація, або наприклад, пари методів МД і Монте-Карло, класичної та прискореної МД, можуть бути застосовані для моделювання систем у інженерії, фізиці, біології, медицині тощо.

МД метод з'явився наприкінці 50-х років і зараз активно розвивається згідно сучасним тенденціям у вигляді відповідних прикладних пакетів з високим ступенем візуалізації, автоматизації та елементами штучного інтелекту. В основі - чисельне розв'язання класичних рівнянь руху, які є втіленням другого закону Ньютона для кожного атома системи. Для рішення 10^2 - 10^6 зв'язаних диференціальних рівнянь другого порядку розробляються відповідні алгоритми, які передбачають використання методів розпаралелювання і суперкомп'ютерної техніки.

Гібридні методи моделювання актуальні для природничих наук і технологій, що є аргументом на користь дисципліни "**Комп'ютерне моделювання мультифізичних систем**". *Відмітимо, що Нобелівська Премія з фізики за 2021 рік була присуджена "... to Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann and Giorgio Parisi "for groundbreaking contributions to our understanding of complex physical systems."*

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)		Вибірковий

Форма навчання (лекції / лабораторні / практичні)	Тривалість (тижнів/місяців)	Мова викладання
лекції / лабораторні	7	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
5	150	50	100
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 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 екзамен, усний екзамен, 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 лабораторних 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	Інші види	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	1				13	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. Потенціали міжатомної взаємодії. Достовірність класичного наближення.	2	1			6	24	15	Лабораторна робота та розв'язання задач
Тема 3. Закони збереження. Центр інерції.	2	1			6	24	15	Розв'язання задач
Тема 4. Моделювання атомних зіткнувальних каскадів методом класичної МД.	2	1			6	29	20	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	1			6	29	20	Лабораторна робота та розв'язання задач
Тема 6. Сумісне розв'язання континуальних рівнянь масоперенесення та МД моделі атомних каскадів зіткнень. Програмні коди сумісного розв'язання.	4	1			6	31	20	Розв'язання задач
Усього годин	14	6			30	150	100	

Стратегія оцінювання	Вага, %	Термін	Критерії оцінювання
Модульна контрольна робота	45	впродовж семестру	Письмове опитування
Виконання лабораторних робіт	11		Лабораторна робота з теми 2
	11		Лабораторна робота з теми 3
	11		Лабораторна робота з теми 4
	11		Лабораторна робота з теми 5
	11	Лабораторна робота з теми 6	
Залік в кінці семестру			

Автори	Рік	Назва	інформація видання	Видавництво / он-лайн доступ
Обов'язкова література				
Habasaki J.	2020	Molecular Dynamics of Nanostructures and Nanoionics. Simulation in Complex Systems.	Навчальний посібник	Jenny Stanford Publishing.- 2020.- 338 p. ISBN 9789814800778 .
Snehanshu Pal, Bankim Chandra Ray.	2020	Molecular Dynamics Simulation of Nanostructured Materials. An Understanding of Mechanical Behavior	Навчальний посібник	CRC Press.- 2020.- 334 p. ISBN 9780367029821.
Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц	1988	Теоретическая физика. Т1. Механика.	Навчальний посібник	М.: Наука, Издание 5-е стер., Глав. Ред. Физ.-Мат. Лит. 2004. – 224 с.
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 http://eir.zp.edu.ua/handle/123456789/7624 .
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.О.Подковаліхіна, О.В. Кривцун, Д.В.Широкопад, В.І. Кіпріч	2021	Методи теоретичної фізики. Механіка	Методичні вказівки	Запоріжжя: НУ “Запорізька політехніка”, 2021. – 60 с. http://eir.zntu.edu.ua/handle/123456789/7772
Укл.: Г.В. Корніч, О.О.Подковаліхіна,	2021	Основи моделювання наносистем	Методичні вказівки	Запоріжжя: НУ “Запорізька політехніка,

О.В. Кривцун, Д.В. Широкопад. В.І. Кіпріч				2021. – 21 с. http://eir.zntu.edu.ua/handle/123456789/7771
Додаткова література				
Behrisch R. (Р. Бериш, П. Зигмунд, М. Робинсон, Х. Андерсен та ін.)	1981(1984)	Sputtering by Particle Bombardment I (Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I)	Тематический сборник	Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1981.- 284 p. ISBN 978-3-662-30888-2 . DOI 10.1007/3-540-10521-2. (Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва: Мир.- 1984. – 336 с.)
Behrisch R. P. (Бериш, Г. Бетц, Г. Венер та ін.)	1983 (1986)	Sputtering by Particle Bombardment II (Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II)	Тематический сборник	Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1983.- 394 p. ISBN 978-3-662-31169-1. DOI 10.1007/3-540-12593-0. (Пер. с англ./ Под ред. Р. Бериша.- Москва: Мир.- 1986. – 486 с.)
Eckstein W. (В. Экштайн)	1991 (1995)	Computer simulation of ion-solid interactions (Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела)	Монография	Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991.- 296 p. ISBN 978-3-642-73515-8, DOI 10.1007/978-3-642-73513-4 (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., Корнич Г.В.	2020	Моделирование диффузии вакансии в кристалле методом температурно-ускоренной динамики	Пер. журнал (ІМФ ім. Г.В. Курдюмова, НАНУ)	Металофізика та Новітні Технології.- 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. and Neutron Tech.- V.13(4) – 2019.- 667-669. http://doi.org/10.1134/S1027451019030066
Duda E.V., Kornich G.V..	2020	Hyperdynamics Simulation of the Diffusion of a Vacancy in a Crystal	Періодичний журнал, Вид. Springer	J. Surf. Invest.: X-ray, Synch. and Neutron Tech.- V.14(6) – 2020.- 1205-1207. http://doi.org/10.1134/

				S1027451020050043)
Kornich G.V., Betz G., Kornich V.G., Shulga V.I., Yermolenko O.A.	2011	Synergism in sputtering of copper nanoclusters on graphite substrate at low energy Cu ₂ bombardment	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 269 (14)-2011.- 1600-1603. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.088 .
Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G.	2017	Simulation of the interaction of bipartite bimetallic clusters with low-energy argon clusters	Період. журнал, Вид. Springer	Physics of the Solid State.- 59(1).- 2017.- 198-208. https://doi.org/10.1134/S1063783417010292 .
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. V.42(7) – 2016.-720-722. http://doi.org/10.1134/S1063785016070282 .
Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V.I., Bazhin A.I.	2004	Sputtering of metal clusters from graphite substrate by low-energy ions	Період. журнал, Вид. РАН	Izvestiya Akademii Nauk. Rossijskaya Akademiya Nauk. Seriya Fizicheskaya. - 68(3).- 2004.- 304-307. ISSN 1026-3489.
Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V.I., Bazhin A.I.	2003	Simulation of ion sputtering of copper clusters from single crystal graphite surface	Періодичний журнал, Вид. Springer	Technical Physics Letters.- 2003.- 29(11).- 938-940. https://doi.org/10.1134/1.1631370
ГВ Корнич, Г Бетц, АИ Бажин	2001	Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов в кристалле алюминия при бомбардировке ионами низких энергий	Період. журнал, ФТІ ім. А.Ф.Іоффе РАН	Физика твердого тела.- 43(1).- 2001.- 30-34.
Kornich G.V., Betz G., King B.V.	1996	Molecular dynamics simulation of low energy ion beam mixing	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Nucl. Instr. and Meth.B.- 1996.- V.115, N1-4.- P.461-467. https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)01439-X
Kornich G.V., Betz G.	1996	Two step simulation of low energy ion beam mixing at different temperatures	Періодичний журнал, Вид. Elsevier	Nucl. Instr. and Meth.B.- 1996.-V.117, N1-2.-P.81-89. https://doi.org/10.1016/0168-583X(96)00274-1