



МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ І ПРОЦЕСІВ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
Освітньо-наукова програма	Прикладна фізика (Applied Physics)
Статус дисципліни	Обов'язкова(нормативна)(цикл загальної підготовки)
Форма навчання	очна(денна)
Рік підготовки, семестр	5(1) курс, осінній семестр
Обсяг дисципліни	4 (120)
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Залік/МКР, ДКР
Розклад занять	Середа: 12.20–13.55 (л/р), 14.15–15.50 (лекц)
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: кандидат технічних наук, доцент, Гордійко Наталія Олександрівна, n.gordiiko@kpi.ua Лабораторні роботи: кандидат технічних наук, доцент, Гордійко Наталія Олександрівна, n.gordiiko@kpi.ua
Розміщення курсу	https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=2922 , https://campus.kpi.ua/tutor/index.php?mode=mob&ir_own

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Навчальна дисципліна «Математичне моделювання систем і процесів» спрямована на розв'язання практичних задач, що виникають в багатьох розділах фізики, та сприяє впровадженню принципів комп'ютерного мислення у вивченні більшості навчальних дисциплін циклу загальної та професійної підготовки. Основними завданнями дисципліни є опис фізичних об'єктів та процесів сучасними засобами математичного моделювання; використання реальних математичних моделей фізичних процесів та їх удосконалення залежно від поставленої задачі; дослідження поведінки фізичного об'єкту або процесу за допомогою побудованої або удосконаленої математичної моделі.

Метою кредитного модуля є формування у студентів **здатностей**:

- здатність до абстрактного та аналітичного мислення, розуміння основних концепцій, парадигми та ідей прикладної фізики (ЗК 1);
- здатність до навчання та самонавчання шляхом пошуку, аналізу та конструктивного синтезу інформації з різних джерел (ЗК 2);
- здатність працювати як автономно, так і в команді професіоналів з прикладної фізики (ЗК 6);
- здатність ініціативно застосовувати знання в області прикладної фізики при вирішенні робочих питань, організації командної роботи, оцінці та забезпеченні якості виконуваних робіт, реалізації проектів (ЗК 7);
- здатність до кваліфікованого проведення досліджень на відповідному рівні під керівництвом

фахівців, включаючи аналіз проблем, постановку цілей і завдань, вибір методів дослідження та аналіз отриманих результатів (ЗК 8);

– здатність адаптуватися та діяти в нових ситуаціях під тиском обставин, зокрема, здатність до самостійного освоєння нових методів дослідження, зміни наукового й виробничого профілю своєї діяльності (ЗК 9);

– здатність генерувати нові ідеї й нестандартні підходи до їх реалізації (креативність) (ЗК 10);

– здатність аналізувати та обробляти результати експерименту із використанням сучасного прикладного програмного забезпечення (ФК 5);

– здатність використовувати методи і засоби математичного моделювання для опису фізичних об'єктів та процесів (ФК 8).

Згідно з вимогами програми навчальної дисципліни студенти після засвоєння кредитного модуля мають продемонструвати такі результати навчання:

знання:

– знання методів теоретичної фізики, спеціальних розділів вищої математики, програмування, прикладних програм і методів обчислення на рівні, необхідному для аналізу і моделювання фізичних процесів і систем (ПРН 2);

– знання методів теоретичної фізики, спеціальних розділів вищої математики на рівні, необхідному для розуміння функціонування та моделювання процесів, що відбуваються в технологічних та технічних системах, в тому числі інформаційних (ПРН 4);

– знання основ професійно-орієнтованих дисциплін спеціальності, зокрема, високих фізичних технологій, сучасного матеріалознавства, біофізики та фізики енергетичних систем (залежно від освітньої траєкторії) на рівні, необхідному для успішної роботи в наукових колективах, що працюють в галузі прикладної фізики (ПРН 5);

уміння:

– вміння застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів, нових матеріалів, речовин і наукоємних технологій в області біофізики, енергетичних та інформаційних систем (залежно від освітньої траєкторії) (ПРН 9);

– вміння класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну, патентну, популярну інформацію в галузі прикладної фізики (ПРН 12);

– вміння використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземною мовами, вміння читати та розуміти фахові англомовні джерела (ПРН 13).

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Місце навчальної дисципліни зазначається у структурно-логічній схемі освітньої програми¹. Дисципліна є забезпечуючою для більшості дисциплін циклу професійної підготовки. Для успішного засвоєння дисципліни студенти повинні мати навички програмування.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Моделі та їх роль у природничих науках.

Тема 2. Сучасні пакети прикладних програм, що використовуються для моделювання в різних сферах досліджень.

Тема 3. Моделювання фізичних процесів, описуваних диференціальними рівняннями.

Тема 4. Моделювання хвильових явищ.

Тема 5. Моделювання статичних електричних та магнітних полів.

Тема 6. Моделювання систем, що складаються з великого числа частинок методом молекулярної динаміки.

Тема 7. Моделювання мікроканонічного та канонічного ансамблів методом Монте-Карло.

Тема 8. Моделювання випадкових систем.

¹ Освітньо-наукова програма «Прикладна фізика (Applied Physics)» другого (магістерського) рівня вищої освіти.

Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. 17 с.:

<https://osvita.kpi.ua/sites/default/files/op/105%20ОНП%20Прикладна%20фізика%202020оновл.pdf>.

Тема 9. Моделювання фрактальних об'єктів.

Тема 10. Моделювання процесів та систем у середовищі MatLab/Simulink.

Тема 11. Квантово-хімічне моделювання. Пакети GaussView та Gaussian.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова

1. Гордійко Н.О. Математичне моделювання систем і процесів. Лекції. – 2020. – Режим доступу: <https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=2922>.
2. Гордійко Н.О. Математичне моделювання систем і процесів. Лабораторні роботи. – 2020. – Режим доступу: <https://do.ipk.kpi.ua/course/view.php?id=2922>.
3. Лазарев Ю.В. MATLAB і моделювання динамічних систем. Навчальний посібник. Глава 3. Пакет програм Simulink. – Київ: НТУУ "КПІ", 2009. – 79 с. – https://kafpson.kpi.ua/Arhiv/Lazarev/uml_3n.pdf.
4. GaussView 5 Reference Table of Contents – <http://gohom.win/ManualHom/Gaussian/G09W/help/toc.htm>.
5. Gaussian 09W Help Table of Contents – file:///C:/g09w/help/g09help.htm.

Допоміжна

6. Лазарев Ю.В. Довідник з MATLAB : Електронний навчальний посібник з курсового і дипломного проектування – К.: НТУУ «КПІ», 2013. – 132 с. – https://kafpson.kpi.ua/Arhiv/Lazarev/dovidnyk_Matlab.pdf.
7. Павленко П.М. Математичне моделювання систем і процесів: навч. посіб./ П.М. Павленко, С.Ф. Філоненко, О.М. Чередніков, В.В. Трейтяк. – К. : НАУ, 2017. – 392 с. – <https://er.nau.edu.ua/bitstream/NAU/37119/1/МАТЕМАТИЧНЕ%20МОДЕЛЮВАННЯ.pdf>.
8. Scherer P. Computational Physics / Philipp O.J. Scherer // Springer International Publishing AG, 2017. – 633 p.
9. Troyer M. Computational Physics / Matthias Troyer . – 2005/2006. – Mode of access: http://share.its.ac.id/pluginfile.php/12408/mod_resource/content/1/buku%20fiskom%20lanjut.pdf.
10. Taylor J.R. An introduction to error analysis / J.R. Taylor. – 1997. – Mode of access: <https://www.worldcat.org/title/introduction-to-error-analysis/oclc/224020031?referer=di&ht=edition>.
11. MatLab [Electronic resource] / MathWorks. – Mode of access: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>.
12. Products [Electronic resource] / Expanding the limits of computational chemistry. – Mode of access: <http://gaussian.com/products>.
13. How to use GaussView 5 to build a molecule. – Mode of access: <https://www.youtube.com/watch?v=GA00p8I3mrE>.
14. Gaussian 09W Tutorial 1: Running a simple Gaussian Calculation + FMO cal + ESP. – Mode of access: <https://www.youtube.com/watch?v=QHQTSSAtRDU>.
15. Gaussian & GaussView Tutorial Videos. – Mode of access: <http://gaussian.com/videos>.

Інформаційні ресурси

16. <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics>
17. <https://www.msg.chem.iastate.edu/index.html>, <http://www.cfs.dl.ac.uk>
18. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.old.html>
19. <https://daltonprogram.org>
20. <https://nwchemgit.github.io>
21. <http://www.hyper.com>
22. <http://www.chemcraftprog.com>
23. <http://www.softsea.com/review/ViewMol3D.html>
24. <https://molekel.software.informer.com>
25. <https://www.ch.cam.ac.uk/computing/software/molden>
26. <https://www.abinit.org>
27. http://bigdft.org/Wiki/index.php?title=BigDFT_website
28. <https://www.cp2k.org>

29. <https://www.cpmc.org/wordpress>
30. <http://elk.sourceforge.net>
31. <http://espresso.md.org/wordpress>
32. <https://www.flapw.de/master>
33. <http://www.gromacs.org>
34. <http://gulp.curtin.edu.au/gulp>
35. <https://lammmps.sandia.gov>
36. <https://mpb.readthedocs.io/en/latest>
37. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd>
38. https://octopus-code.org/wiki/Main_Page
39. <http://www.openmx-square.org>
40. <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>
41. <http://www.quantum-espresso.org>
42. <https://departments.icmab.es/leem/siesta>
43. <https://www.vasp.at>
44. <http://www.wannier.org>
45. <http://susi.theochem.tuwien.ac.at>
46. <https://www.ikp.kit.edu/corsika>
47. <https://fbpic.github.io>
48. <https://geant4.web.cern.ch>
49. <https://lcode.info>
50. <http://warp.lbl.gov>
51. <https://www.openfoam.com>
52. <https://www.salome-platform.org>

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни

Тема 1. Моделі та їх роль у природничих науках. (Предмет теорії моделювання, принципи моделювання, функції моделей, види моделей та їх класифікація, математичні схеми моделювання систем, основні етапи моделювання систем, обробка й аналіз результатів моделювання.)

Тема 2. Сучасні пакети прикладних програм, що використовуються для моделювання в різних сферах досліджень. (Основні відомості про спеціалізовані пакети прикладних програм для математичного моделювання систем та процесів, що використовуються в фізиці, квантовій хімії, матеріалознавстві, біофізиці та науках про життя, інженерних науках тощо.)

Темам 1,2 присвячена вступна лекція.

Тема 3. Моделювання фізичних процесів, описуваних диференціальними рівняннями. (Алгоритм розв'язання в системі MatLab. Солвери. Метод Рунге-Кутта четвертого порядку. Жорсткість системи звичайних диференціальних рівнянь. Солвери, що використовуються для розв'язання жорстких систем диференціальних рівнянь.) Темі 3 присвячено лекція 1 та лабораторна робота 1, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 4. Моделювання хвильових явищ. (Моделювання вільних та змушених коливань ланцюжка зв'язаних гармонічних осциляторів. Моделювання хвильових явищ.) Темі 4 присвячено лекцію 2 та лабораторну роботу 2, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 5. Моделювання статичних електричних та магнітних полів. (Електричне поле системи нерухомих електричних зарядів. Магнітне поле витка з постійним струмом. Магнітне поле тороїдальної обмотки з постійним струмом. Розв'язання одновимірної крайової задачі, описаної рівнянням другого порядку (числовий розв'язок рівнянь Лапласа та Пуассона). Темі 5 присвячено лекцію 3 та лабораторну роботу 3, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 6. Моделювання систем, що складаються з великого числа частинок методом молекулярної динаміки. (Математична модель статистичної системи. Обчислювальний алгоритм розв'язання системи рівнянь руху. Моделювання системи, що складається з великого числа частинок, методом молекулярної динаміки. Оцінювання макроскопічних характеристик статистичної системи. Оцінювання коефіцієнтів переносу методом молекулярної динаміки. Моделювання фазових переходів методом молекулярної динаміки.) Темі 6 присвячено лекцію 4 та лабораторну роботу 4, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 7. Моделювання мікроканонічного та канонічного ансамблів методом Монте-Карло. (Мікроканонічний ансамбль. Модель Ізінга. Метод Монте-Карло. Канонічний ансамбль. Алгоритм Метрополіса для канонічного ансамбля. Моделювання двовимірної моделі Ізінга методом канонічного ансамбля.) Темі 7 присвячено лекцію 5 та лабораторну роботу 5, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 8. Моделювання випадкових систем. (Випадкові кроки (random walk). Рух без перехрещень (SAW). Моделювання зростання кластерів.) Темі 8 присвячено лекцію 6.

Тема 9. Моделювання фрактальних об'єктів. (Фрактальна розмірність об'єктів. Фрактальні структури. Крива Коха. L-системи та терл-графіка. Алгебраїчні фрактальні структури. Стохастичні фрактальні структури. Системи ітерованих функцій. Застосування фрактальних структур.) Темі 9 присвячено лекцію 7 та лабораторну роботу 6, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання, що складається з 4 частин, за темою.

Тема 10. Моделювання процесів та систем у середовищі MatLab/Simulink. (Загальні відомості про програмний комплекс Simulink. Розв'язуючі елементи. Моделі алгебраїчних об'єктів. Моделі динамічних об'єктів.) Темі 10 присвячено лекцію 8 та лабораторну роботу 7, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

Тема 11. Квантово-хімічне моделювання. Пакети GaussView та Gaussian. (Основи застосування Gaussian. Моделювання молекули за допомогою GaussView та визначення її геометричних параметрів. Проведення розрахунків.) Темі 11 присвячено лекцію 9 та лабораторну роботу 8, яка полягає у виконанні (програмуванні) та захисті студентом індивідуального завдання за темою.

6. Самостійна робота студента

Види самостійної роботи:

- підготовка до аудиторних занять – 15 год.
- підготовка до лабораторних занять, аналіз результатів лабораторних робіт, оформлення звітів (протоколів) – 37 год.
- підготовка до модульної контрольної роботи (МКР), оформлення протоколу роботи – 4 год.
- виконання домашньої контрольної роботи (ДКР), аналіз результатів, оформлення протоколу роботи – 6 год.
- підготовка до заліку – 4 год.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни

Програмні результати навчання, контрольні заходи, терміни виконання та рейтингова система оцінювання результатів навчання оголошуються студентам на першому занятті.

Захист лабораторної роботи проводиться шляхом демонстрації на екрані комп'ютеру результатів роботи відповідної програми, написаної студентом, а також відповідей на контрольні питання за темою роботи з наданням на e-mail викладача протоколу роботи з наведеними в ньому умовою задачі, відповідними результатами роботи, програмного коду розв'язання задачі та висновками.

МКР та ДКР оформлюються аналогічно протоколу лабораторної роботи та надсилається на e-mail викладача.

Результати лабораторних робіт, МКР та ДКР оголошуються індивідуально кожному студенту із зауваженнями та коментарями щодо основних помилок та недоліків.

Студент має можливість зробити пропущену МКР, але максимальний бал за неї дорівнюватиме 50% від набраної кількості балів. Повторне написання модульної контрольної роботи не допускається.

За результатами роботи студента у семестрі відповідно до РСО на останньому за розкладом занятті викладач проводить залік. Позитивна оцінка із заліку "автоматом" виставляється, якщо студент має підсумковий рейтинг не менше 60 балів ($RD \geq 60$) та не має заборгованостей з робіт, передбачених силабусом на семестр з даного кредитного модуля, а саме: виконані та захищені всі лабораторні та модульна контрольна роботи, а також дві позитивні атестації. Якщо студент не отримав залік за РСО, але виконав умови допуску до семестрового контролю, залік виставляється за результатами залікової контрольної роботи або підсумкової співбесіди.

Порушення термінів виконання завдань та заохочувальні бали

Заохочувальні бали		Штрафні бали	
Критерій	Ваговий бал	Критерій	Ваговий бал
Оригінальний творчий підхід при виконанні завдань, виступ з доповіддю, друкована робота, участь та призове місце на олімпіаді або у конкурсі тощо (за тематикою навчальної дисципліни)	1–5 балів	Порушення термінів захисту лабораторної роботи (після відповідної атестації), для кожної роботи	максимальний бал – "добре" (9 балів)
		Кожна наступна спроба захисту лабораторної роботи, для кожної роботи	-1 бал
		Порушення термінів виконання МКР (після відповідної атестації)	50% набраних балів

Політика та принципи академічної доброчесності визначені у розділі 3 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Норми етичної поведінки студентів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Студенти мають можливість підняти будь-яке питання, яке стосується процедури контрольних заходів та очікувати, що воно буде розглянуто згідно із наперед визначеними процедурами.

Студенти мають право оскаржити результати контрольних заходів, але обов'язково аргументовано пояснивши, з яким критерієм не погоджуються відповідно до оціночного листа та/або зауважень.

У разі настання несприятливої епідеміологічної ситуації та в інших випадках, що мають характер надзвичайних ситуацій, а також ситуацій, що передбачають відсутність можливості навчатися у традиційному режимі, допускається навчання з навчальної дисципліни згідно з регламентом організації освітнього процесу в дистанційному режимі². Це передбачає наявність доступу студентів до мережі Інтернет та відповідного технічного (комп'ютер, планшет, смартфон тощо) і програмного забезпечення.

Студенти отримують інформацію лекційного матеріалу через засоби телекомунікаційного зв'язку в синхронному або асинхронному режимі, виконують всі передбачені програмою навчальної дисципліни лабораторні та модульні контрольні роботи в асинхронному режимі з можливістю отримання консультації (у формі чату, форуму, особистих повідомлень тощо), а також захищають їх в синхронному режимі у формі відеоконференції.

² Додаток 1 до наказу КПУ ім. Ігоря Сікорського №7/148 від 21.08.2020 року «Про заходи щодо організації та проведення освітнього процесу в осінньому семестрі 2020/2021 навчального року».

Навчальна дисципліна може викладатися для студентів з особливими освітніми потребами, окрім тих, хто має серйозні вади, що не дозволяють користуватися комп'ютером. Організація навчання здобувачів вищої освіти з особливими освітніми потребами регламентується Положенням про організацію інклюзивного навчання у КПІ ім. Ігоря Сікорського (наказом №7-175 від 30.09.2020). Детальніше: <https://osvita.kpi.ua/node/172>.

Враховуючи особливості навчальної дисципліни, деякі поняття та навчальний матеріал вивчаються англійською мовою.

Враховуючи студентоцентризований підхід, за бажанням студентів, допускається вивчення окремих тем за допомогою відповідних іншомовних електронних ресурсів.

Консультації (індивідуальні та групові) з навчальної дисципліни та самостійна робота студентів можуть проводитись у науковій лабораторії, в науково-технічній бібліотеці університету та/або дистанційно у домашніх умовах.

Навчальний матеріал, передбачений для засвоєння студентом у процесі самостійної роботи, виноситься на підсумковий контроль разом з навчальним матеріалом, що вивчався при проведенні аудиторних навчальних занять.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Поточний контроль: лабораторні роботи, МКР, ДКР.

Лабораторні роботи оцінюються із 10 балів:

- «відмінно» – повний результат (не менше 95% зробленої роботи) – 10 балів;
- «добре» – достатньо повний результат (не менше 75% зробленої роботи), або повна результат з незначними неточностями – 8–9 балів;
- «задовільно» – неповний результат (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 7 балів;
- «незадовільно» – результат не відповідає вимогам на «задовільно» – 0–6 балів.

МКР та ДКР оцінюються з 8 балів кожна за такими критеріями:

- «відмінно» – повна відповідь (не менше 95% вірної інформації) – 8 балів;
- «добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% вірної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 6–7 балів;
- «задовільно» – неповна відповідь (не менше 60% вірної інформації) та незначні помилки – 5 балів;
- «незадовільно» – завдання не виконане, відповідну частину МКР не зараховано – 0–4 бали.

Максимальний бал за пропущену МКР дорівнює 50% від набраної кількості балів.

Календарний контроль: провадиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу згідно з порядком та графіком проведення проміжної атестації.

Семестровий контроль: залік.

Умови допуску до семестрового контролю: зарахування 8 лабораторних робіт, мінімально позитивні оцінки за МКР та ДКР та семестровий рейтинг не менше 60 балів.

Рейтинг студента з кредитного модуля складається з балів, що він отримує за:

- виконання та захист 8 лабораторних робіт;
- виконання МКР;
- виконання ДКР;
- заохочувальних балів;
- від'ємних штрафних балів.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни

Перелік питань, які виносяться на семестровий контроль (залік):

- 1) Моделі та їх роль у природничих науках. Предмет теорії моделювання, принципи моделювання, функції моделей, види моделей та їх класифікація, математичні схеми моделювання систем, основні етапи моделювання систем, обробка й аналіз результатів моделювання.
- 2) Сучасні пакети прикладних програм, що використовуються для моделювання в різних сферах досліджень.
- 3) Моделювання фізичних процесів, описуваних диференціальними рівняннями. Алгоритм розв'язання. Солвери. Метод Рунге-Кутта.
- 4) Жорсткість системи звичайних диференціальних рівнянь. Солвери, що використовуються для розв'язання жорстких систем диференціальних рівнянь.
- 5) Моделювання вільних коливань.
- 6) Моделювання змушених коливань.
- 7) Моделювання хвильових явищ.
- 8) Моделювання електричного поля системи нерухомих зарядів.
- 9) Моделювання магнітного поля витка з постійним струмом.
- 10) Моделювання магнітного поля тороїдальної обмотки з постійним струмом.
- 11) Розв'язання одновимірної крайової задачі, описаної рівнянням другого порядку (чисельний розв'язок рівнянь Лапласа та Пуассона).
- 12) Математична модель статистичної системи.
- 13) Обчислювальний алгоритм розв'язання системи рівнянь руху для багаточастинкової системи.
- 14) Моделювання багаточастинкової системи методом молекулярної динаміки.
- 15) Оцінювання макроскопічних характеристик статистичної системи.
- 16) Оцінювання коефіцієнтів переносу методом молекулярної динаміки.
- 17) Моделювання фазових переходів методом молекулярної динаміки.
- 18) Моделі випадкових систем. Випадкові кроки (random walk).
- 19) Моделі випадкових систем. Рух без перехрещень (SAW).
- 20) Моделювання зростання кластерів, фрактальна розмірність об'єктів.
- 21) Фрактальні структури та їх застосування. Крива Коха.
- 22) Геометричні фрактальні структури. Рекурсивний алгоритм побудови фрактальних об'єктів.
- 23) Геометричні фрактальні структури. L-системи та терл-графіка.
- 24) Системи ітерованих функцій.
- 25) Алгебраїчні фрактальні структури.
- 26) Стохастичні фрактальні структури.
- 27) Моделювання у середовищі MatLab/Simulink. Основні переваги пакету розширення Simulink. Розв'язуючі елементи. Загальний алгоритм побудови S-моделі
- 28) Моделювання у середовищі MatLab/Simulink. Моделі алгебраїчних об'єктів.
- 29) Моделювання у середовищі MatLab/Simulink. Моделі динамічних об'єктів.
- 30) Пакет квантово-хімічних розрахунків Gaussian. Основи застосування.

- 31) Пакет квантово-хімічних розрахунків *Gaussian*. Моделювання молекули за допомогою *GaussView* та визначення її геометричних параметрів.
- 32) Проведення розрахунків у *Gaussian*.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентом кафедри прикладної фізики, к.т.н., доц., Гордійко Наталією Олександрівною

Ухвалено спільним засіданням кафедр прикладної фізики та фізики енергетичних систем (протокол №7/21 від 02.06.2021 р.)

Погоджено Методичною комісією Фізико-технічного інституту (протокол №6 від 29.06.2021 р.)