

## СИЛАБУС

### “Комп’ютерне моделювання фізичних процесів”

Національна академія наук України  
Інститут фізики конденсованих систем  
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія

Лектор: д. фіз.-мат. наук Я.М. Ільницький  
[iln@icmp.lviv.ua](mailto:iln@icmp.lviv.ua)  
ІФКС НАН України, вул. Свенціцького 1, Львів  
032-2761978

#### Опис курсу

Курс ділиться на чотири частини. Перша (вступна) містить основні відомості про практичне застосування функціональних матеріалів в технології, біофізиці та медицині та особливості їх моделювання на різних просторово-часових масштабах. Друга частина присвячена детерміністичному методу класичної молекулярної динаміки, де розглядаються різні форми потенціалів міжчастинкової взаємодії та інтегратори рівнянь руху. У третій частині розглянуто стохастичний метод Монте Карло та розглянуто його застосування до магнітних систем та полімерів. Четверта частина присвячена мезоскопічним методам, які за своєю природою є стохастично-детерміністичними, зокрема, Бравновій, Ланжевенівій та дисипативній динаміці та методу коміркового автомату.

#### Мета курсу

Мета навчальної дисципліни – освоїти основні принципи комп’ютерного моделювання фізичних процесів на різних рівнях деталізації. Опанувати принципи таких методів як: молекулярна динаміка, Монте Карло, Бравнова та дисипативна динаміка та методу коміркового автомату. Познайомитись із практичними застосуваннями цих підходів у таких областях як: розробка нових функціональних наноматеріалів, біофізика та медицина. Навчитись виконувати комп’ютерне моделювання фізичних систем на класичних прикладах моделі

Ізінга, Леннард-Джоунсової рідини та процесах, що описуються комірковими автоматами.

Внаслідок вивчення навчальної дисципліни аспірант повинен бути здатним продемонструвати такі **результати навчання** :

1. Знати основні принципи побудови моделей на атомарному та мезоскопічному рівнях.
2. Засвоїти широковживані потенціали взаємодії для опису ван дер Ваальсових, ковалентних та електростатичних сил.
3. Знати алгоритми Монте Карло, молекулярної та дисипативної динаміки, методу коміркового автомату.
4. Елементарні навички роботи в операційній системі Unix та базові програмні продукти.
5. Вміти виконати повний цикл моделювання: від побудови моделі та формування початкової конфігурації до отримання рівноважної статистики системи для заданих термодинамічних параметрів.
6. Вміти здійснити аналіз отриманих результатів комп'ютерного моделювання для опису структурних та динамічних характеристик.
7. Розуміти особливості застосування засвоєних методів в різних областях фізики та біофізики.

### Структура навчальної дисципліни

Найменування показників	Всього годин
	Денна форма
Кількість кредитів/год.	5/150
Усього годин аудиторної роботи, у т.ч.:	80
• лекційні заняття, год.	48
• семінарські заняття, год.	16
• практичні заняття, год.	-
• лабораторні заняття, год.	16
Усього годин самостійної роботи, у т.ч.:	70
• контрольні роботи, к-сть/год.	-
• розрахункові (розрахунково-графічні), к-сть/год.	-
• індивідуальне науково-дослідне завдання, к-сть/год.	28
• підготовка до навчальних занять та контрольних заходів, год.	42
Екзамени	1
Заліки	-

Частка аудиторного навчального часу студента у відсотковому вимірі – 53.3%

## Опис навчальної дисципліни

### Лекційні заняття

№ п/п	Назви тем	К-сть годин
1.	<p><b>Функціональні матеріали: застосування та особливості моделювання</b></p> <p>Актуальність розробки нових функціональних матеріалів для енергетики, біології та медицини. Особливості поведінки систем багатьох частинок на різних просторово-часових масштабах. Квантові симуляції, наближення Борна-Оппенгаймера, класичні атомарні симуляції, мезоскопічні симуляції. Основні типи міжчастинкових взаємодій. Наявні пакети програм та розробка власних продуктів – за і проти.</p>	12
2.	<p><b>Метод молекулярної динаміки</b></p> <p>Метод молекулярної динаміки: принципи методу, числові алгоритми інтегрування рівнянь руху. Модельна комірка, періодичні граничні умови, засоби оптимізації обчислень. Молекулярна динаміка систем несферичних молекул та систем із далекосяжними взаємодіями. Молекулярна динаміка в різних термодинамічних ансамблях. Розрахунок структурних та динамічних характеристик, застосування до моделювання властивостей рідких кристалів, рідкокристалічних полімерів та оптично-активних полімерів.</p>	12
3.	<p><b>Метод Монте Карло</b></p> <p>Історія виникнення та принципи методу Монте-Карло. Переважна вибірка, алгоритми Метрополіса та Глаубера. Граткові моделі, метод Монте Карло для моделі Ізінга та n-векторної моделі. Кластерні методи Монте Карло. Застосування методу Монте-Карло до моделювання рідин, полімерів та макромолекул. Монте-Карло в різних термодинамічних ансамблях. Спеціалізовані алгоритми Монте-Карло.</p>	12
4.	<p><b>Мезоскопічні методи</b></p> <p>Огрублена молекулярна динаміка. Бравнова та Ланжевеніна динаміка. Дисипативна динаміка. Застосування до моделювання наноструктурованих матеріалів. Самоорганізація в макромолекулярних системах. Метод коміркового автомату. Застосування до моделювання явища перколяції та в епідеміології. Переваги та недоліки мезоскопічного моделювання.</p>	12
<b>Усього годин</b>		48

### Лабораторні заняття

№ теми	Назви тем	Кількість Годин
1	Основи роботи в операційній системі Unix: bash, Midnight Commander, Gnuplot та Rasmol. Вивчення структурних властивостей простої рідини за допомогою методу молекулярної динаміки. Комп'ютерне моделювання рідкокристалічних фаз моделі частинок, що описуються потенціалом Гей-Берне.	4
2	Моделювання поведінки магнітних систем на основі симуляцій моделі Ізінга методом Монте Карло. Застосування кластерних алгоритмів Вольфа та Свендвена-Ванга.	4
3	Моделювання самоорганізації систем декорованих наночастинок золота методом огрубленої молекулярної динаміки. Вивчення мікрофазового розшарування системи лінійних діблок-кополімерів методом дисипативної динаміки.	4
4	Застосування коміркового автомату до вивчення порогу перколяції та до задач про поширення захворювань у епідеміології.	4
<b>Усього годин</b>		16

### Семінарські заняття

№ теми	Назви тем	Кількість Годин
1	Самоорганізація в системах поліфільних частинок за відсутності та присутності зовнішніх чинників	4
2	Історія виникнення методу Монте Карло та молекулярної динаміки, «Шкотська книга» та роль львівської школи математиків	4
3	Явище міцелуутворення в амфифільних системах та його застосування до систем адресної доставки ліків	4
4	Фотокеровані процеси як основа «чистих» технологій та медичні застосування фотокерованої самоорганізації, міцелізації та деміцелізації	4
<b>Усього годин</b>		16

### Самостійна робота

№	Найменування робіт	кількість год.
1.	Індивідуальне науково-дослідне завдання (тематичні	28

	презентаційні доповіді)	
2.	Підготовка до навчальних занять та контрольних заходів	42
<b>Усього годин</b>		70

### Критерії оцінювання результатів навчання студентів

Максимальна оцінка в балах						
Поточний контроль				Екзаменаційний контроль		Разом за дисципліну
Лабораторні заняття	Практичні заняття	Самостійна робота	Разом балів (ПК)	Письмова компонента	Усна компонента	
-	10	10	20	-	80	100

Нижні межі оцінок:

88% А

80% В

70% С

### Рекомендована література

#### Базова

1. M.Allen, D.Tildesley. Computer simulation of liquids. Oxford Press, London, 1988.
2. Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Часть 2. – М.: Мир, 1990, – 400 с.
3. A.R. Leach. Molecular Modelling: Principles and applications, 2nd edition. – Prentice Hall, 2001, – 784 pp.
4. D. Frenkel, B. Smit. Understanding Molecular Simulation. 2nd edition. – Academic Press, 2001, – 600 pp.
5. К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике: Введение. – Наука, Физматлит, 1995, – 144 с.
6. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М: Наука, 1990, – 176 с.
7. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону, “Феникс”, 1997, 560 ст.
8. А.Свідзинський. Математичні методи теоретичної фізики, Київ 2009, видавництво Інституту теоретичної фізики ім. Боголюбова, том 2., 394 с.

9. C.P. Poole, Jr., F.J. Owens, Introduction to Nanotechnology, J.Wiley and sons, New Jersey, 2003, - 388pp.
10. A.-L. Barabasi, H. E. Stanley. Fractal Concepts in Surface Growth. –Cambridge University Press, Cambridge, 1995, – 386pp

### **Інформаційні ресурси**

Віртуальне навчальне середовище Інституту фізики конденсованих систем, авторські розробки та наукові статті науково-педагогічних працівників, бібліотечний фонд Інституту фізики конденсованих систем НАН України