



ВИБРАНІ МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО АНАЛІЗУ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	Третій (освітньо-науковий)
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	104 Фізика та астрономія
Освітня програма	Фізика
Статус дисципліни	Нормативна
Форма навчання	Очна (денна)
Рік підготовки, семестр	2 курс, весінній семестр
Обсяг дисципліни	4 кредита/120 годин
Семестровий контроль/ контрольні заходи	Екзамен МКР
Розклад занять	час і місце проведення аудиторних викладені на сайті http://rozklad.kpi.ua/
Мова викладання	Українська
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лекції, лабораторні заняття: доктор фізико-математичних наук, професор Горшков В'ячеслав Миколайович, e-mail: vn.gorshkov@gmail.com
Розміщення курсу	Електронний кампус КПІ ім. Ігоря Сікорського

Програма навчальної дисципліни

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

Досягнення сучасної науки в сфері високих технологій - електроніці, інформаційних технологіях, мікромеханіки - пов'язані з фундаментальними і прикладними дослідженнями, конструюванням і практичним використанням матеріалів і пристроїв, елементи яких мають розміри менше 100 нанометрів. Принципово нові фізичні властивості таких об'єктів зумовлюють унікальні експлуатаційні характеристики прикладних розробок, створених на базі інтеграції багатьох «первинних» нанорозмірних елементів. Елементна база, в свою чергу, потребує розвитку фізико-технічних засад керованого синтезу її складових, що потребує оптимізації низки фізичних процесів для формування необхідних фізичних властивостей об'єктів наносвіту. В значній мірі вирішення комплексу вказаних проблем пов'язано з чисельним моделюванням динаміки систем з багатьох тисяч атомів, що забезпечено постійно зростаючими обчислювальними ресурсами сучасних ЕОМ.

Пакети вже розроблених командами науковців/програмістів відповідних програм значно полегшують виконання фізичних досліджень, але часто виникає необхідність проведення дослідження в незвичному ракурсі. Для здавалось би незначного, на перший погляд, корегування відомих алгоритмів потрібно в досконалості знати як математичні основи цих алгоритмів, так і технічні хитрощі при написанні відповідного коду. Крім того, молодим дослідникам не часто вдається якісно інтерпретувати отримані результати для встановлення глибинних зв'язків між різноманітними фізичними факторами, важливих для побудови цілісної теорії явища, що вивчається. Запропонований учбовий курс на конкретних прикладах (з досвіду роботи автора курсу в Центрі передових технологій штату Нью-Йорк, Лос Аламоської

національної лабораторії США та London Imperial College, UK) поглиблено знайомить з принципами, які закладені в основи фізичних обчислень, та дає навички побудови якісних моделей фізичних явищ для встановлення головних факторів, які визначають їх динаміку і відкривають можливості контрольованого впливу на неї при варіації внутрішніх та зовнішніх параметрів. Крім того, на лабораторних заняттях аспіранти набудуть досвід представлення отриманих результатів в презентаціях високого рівня інформативності, структурованості, легкого, але вагомого розкриття змісту доповідей і, що також важливо, художнього оформлення графічного та відео- матеріалу досліджень.

Програмні результати навчання:

Компетентності:

ЗК07. Здатність працювати автономно.

ФК02. Здатність здійснювати усну і письмову презентацію результатів власного наукового дослідження українською мовою та застосовувати сучасні інформаційні технології у науковій та навчальній діяльності.

ФК06. Здатність розробляти оптимальні алгоритми при комп'ютерному моделюванні фізичних процесів.

Уміння:

ПРН03. Уміти формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичного аналізу, експериментальних досліджень і математичного та/або комп'ютерного моделювання, наявні літературні дані.

ПРН04. Вміти застосовувати знання основ аналізу та синтезу в різних предметних областях, критичного осмислення й розв'язання науково-дослідних проблем, розробляти та досліджувати концептуальні, математичні і комп'ютерні моделі процесів і систем, ефективно використовувати їх для отримання нових знань та/або створення інноваційних продуктів у фізиці та дотичних міждисциплінарних напрямках.

ПРН05. Уміти планувати і виконувати експериментальні та/або теоретичні дослідження з фізики та дотичних міждисциплінарних напрямків з використанням сучасних інструментів, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті усього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми.

ПРН06. Уміти застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.

ПРН12. Уміти оцінювати ефективність чисельних методів та розробляти оптимальні алгоритми при комп'ютерному моделюванні фізичних процесів.

При засвоєнні матеріалу дисципліни аспіранти отримають досвід побудови складних математичних моделей в різних розділах фізики: фізики плазми, квантовій механіці, сингулярній оптиці, акустичних метаматеріалах, фізики квазіодновимірних нанооб'єктів, магніторезонансній мікроскопії. Всі перелічені розділи відрізняються назвами, але базові підходи для чисельного дослідження фізичних процесів різного походження багато в чому співпадають. Рідко яка фізична проблема має точне вирішення. В кожному конкретному випадку перед дослідником стоїть задача вибору різного роду наближень, які не повинні значно спотворювати кінцевий результат. Відповідно до цих наближень будується (або обирається) математична модель явища (пакет програм), яка забезпечить і точність результату, і фізичну реальність часу обчислень. Дати аспірантам відповідний досвід в вирішенні перелічених вище проблем (загальних для багатьох розділів фізики) на конкретних прикладах – мета представленого курсу.

Окремі розділи – чисто технічні. Вони пов'язані з методами розрахунку електричних та магнітних полів в динамічних системах, «хитроцям» в програмуванні многорівневих логічних блоків та візуалізацію отриманих результатів, як для їх обробки/аналізу, так і для публікацій/презентацій.

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

Вивчення даної дисципліни базується на дисциплінах «Фізика твердого тіла», «Термодинаміка і статистична фізика», «Квантова механіка». Необхідні також знання вищої математики та досвід математичного моделювання і програмування, який аспіранти отримують під час навчання на 1 – 4 курсах та в магістратурі. Необхідним також є базовий рівень володіння англійською мовою для читання посібників та оригінальних наукових статей в англомовних журналах.

Знання, отримані аспірантами з дисципліни «Вибрані методи комп'ютерного аналізу», використовуються при підготовці аспірантами наукових доповідей та наукових статей, а також при захисті дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 120 годин/ 4 кредити ECTS.

Рекомендований розподіл навчального часу

Форма навчання	Всього		Розподіл навчального часу за видами занять					Семестрова атестація
	кредитів	годин	Лекції	Лабораторні заняття	СРС			
					Підготовка до екзамену	МКР	Підготовка до занять	
Денна	4	120	18	36	30	10	26	екзамен

Дисципліна «Вибрані методи комп'ютерного аналізу» включає наступні теми:

Тема 1. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу. Характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень. Різницеві схеми апроксимації диференціальних рівнянь. Їх загальна порівняльна характеристика. Консервативні різницеві схеми та їх чисельна стійкість.

- Тема 2. Рівняння в часткових похідних параболічного типу в явищах переносу речовини, квантовій механіці, оптиці, електродинаміці. Методи чисельного розв'язку квазілінійних рівнянь такого типу.*
- Тема 3. Чисельне вивчення ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання в квантовій механіці. Квазікласична модель якісної інтерпретації цих ефектів. Розвиток навичок передбачення результатів моделювання при варіації параметрів як хвильового пакету (елементарної частинки), так і потенційного бар'єру на основі розвинутих якісних концепцій цих явищ.*
- Тема 4. Сингулярна оптика, обертальний момент оптичних вихорів. Методи генерації оптичних вихорів. Якісний аналіз трансформації хвильового фронту лазерного променя при формуванні оптичного вихора. Чисельне моделювання самовідродження оптичного вихору за непрозорим екраном, який відсікає його більшу частину. Глибокий якісний аналіз цього незвичного і повчального фізичного явища.*
- Тема 5. Проблеми фокусування сильнострумових потоків важких іонів. Принципи роботи плазмової лінзи. Методи моделювання плазмових систем на прикладі цього пристрою. Побудова фізичних концепцій при вирішенні проблем пошуку оптимальних параметрів лінзи (найбільш ефективного розподілу потенціалу на циліндричних електродах та розподілу магнітного поля в її об'ємі).*
- Тема 6. Оригінальні алгоритми розрахунку електричного та магнітного полів на прикладі плазмової лінзи. Методи формування рівнянь для густини електричного заряду на електродах системи та густини поверхневих струмів намагнічування на її магнітних елементах.*
- Тема 7. Методи Монте-Карло для дослідження динаміки багаточастинкових систем. Методи молекулярної динаміки. Модель решіткового газу. Поверхнева дифузія атоmів. Умова детального балансу в Монте-Карло моделях та методика контролю його виконання.*
- Тема 8. Високоточні консервативні схеми інтегрування самоузгоджених рівнянь руху частинок в випадках, коли критичним для результату моделювання є їх навіть надмалий «чисельний розігрів/охолодження». Приклади: оптимізація пастки для ультрахолодних нейтронів, динаміка системи магнітних моментів в магніторезонансній мікроскопії.*
- Тема 9. Синтез наночастинок та просторово-періодичних наноструктур в дифузійному режимі. Самоузгоджена трансформація просторових і поверхневих дифузійних потоків атомів з модифікацією форми наночастинок в процесі синтезу. Фізичні засади керування геометричними параметрами самовпорядкованої синтезованої наноструктури. Монте-Карло модель динаміки таких систем.*

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література

1. *Computational Physics-Problem Solving with Computers, Enlarged eTextBook Python 3rd Edition. RUBIN H. LANDAU, Oregon State University; MANUEL JOSE PAEZ, University of Antioquia; CRISTIAN C. BORDEIANU, University of Bucharest, 526 pages*
2. *Computational Physics, Morten Hjorth-Jensen. University of Oslo, Fall 2010, 514 pages*
3. *Computational Physics, Richard Fitzpatrick, Professor of Physics, The University of Texas at Austin, 322 pages*
4. *Computational Physics. Simulation of Classical and Quantum Systems, Philipp O.J. Scherer. Springer, 2010, 336 pages*
5. *Magnetic Resonance Force Microscopy and a Single-Spin Measurement. Gennady P Berman, Fausto Borgonovi, Vyacheslav N Gorshkov, Vladimir I Tsifrinovich. World Scientific, 2006, 235 pages*

Додаткова література

1. *Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations, 2009, Series Editor Nicola Bellomo, Springer Science+Business Media, LLC, 359 pages*
2. *Monte Carlo methods for applied scientists. 2015, I. Dimov, World Scientific, 308 pages*
3. *Numerical Problems in Solid State Physics, M.A. Wahab. Narosa, 141 pages*
4. *Computational Physics. David Potter, Imperial College, London, 285 pages*
5. *Computational Physics With Python, Dr. Eric Ayars, California State University, Chico, 194 pages*

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

№	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
1	 <p>Тема 1. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень.</p> <p>А) - Схема технологічного циклу чисельного експерименту. 1 – побудова математичної моделі, 2- вибір різницевої схеми, 3-програмування, 4 –розрахунки на ком'ютері, 5-порівняння результатів розрахунку з експериментом, 6 –</p>

	<p>уточнення моделі.</p> <p>Явні та неявні різницеві схеми. Проблема стійкості обчислень в інтегруванні диференціальних рівнянь. Методика визначення необхідних (і достатніх) розмірів комірок різницевої схеми. Переваги консервативних різницевих схем. Інтегрування систем диференціальних рівнянь.</p>
2	<p>Тема 2. Різноманіття фізичних явищ, математичний опис яких базується на диференційному рівнянні в часткових похідних параболічного типу. Явна, чисто неявна різницева схема та схема Кранка-Николса для його інтегрування. Відмінності у властивостях цих схем при застосуванні в області комплексних чисел. Метод змінних напрямків в 2-3-вимірних системах. Метод прогонки розв'язку систем лінійних алгебраїчних рівнянь з три-діагональною матрицею.</p>
3	<p>Тема 3. Хвильовий пакет в оптиці та квантовій механіці. Фазова швидкість його складових та групова швидкість пакету як цілого в різних середовищах. «Розпливання» хвильового пакету у просторі. Квазікласична інтерпретація ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання в квантовій механіці. Чисельне моделювання цих процесів та методика аналітичних оцінок їх фізичних характеристик. Проходження елементарної частинки через дворівневу квантову систему.</p>
4	<p>Тема 4. Опис поширення лазерного променя в параксіальному наближенні. Фізика формування оптичного вихору, його обертальний момент. Використання оптичних вихорів в пристроях нанооптики та в наномеханіці. Чисельне моделювання поширення «залишку» оптичного вихора після проходження непрозорого екрану. Чисельне моделювання поширення двох співвісних гаусових променів різної ширини з формуванням «доріжки Кармана» оптичних вихорів.</p>
5	<p>Тема 5. Фокусування потоків заряджених частинок. Сильнострумові звазінейтральні потоки та проблеми їх фокусування. Конструкція плазмової лінзи з комбінацією електричних і магнітних полів. Еквіпотенціальність силових ліній магнітного поля в лінзі. Методи чисельного моделювання динаміки плазмових систем на прикладі плазмової лінзи.</p>
6	<p>Тема 6. Методи розрахунку електричного поля в системах електродів з заданими потенціалами їх поверхні. Алгоритм визначає розподіл густини електричного заряду на електродах з подальшою можливістю обчислення потенціалу/напруженості електричного поля в довільних зонах простору. Аналогічний алгоритм визначає поверхневі струми магнетика, які знаходяться в зовнішньому магнітному полі. В плазмовій лінзі магнітне поле формується двома циліндричними накінецьниками складної форми, між якими вставлено кільцевий постійний магніт. Форма накінецьників відповідає умові формування магнітного поля з оптимальною для фокусування морфологією. Детальний якісний аналіз результату взаємодії плазми з електро-магнітним полем в об'ємі лінзи.</p>
7	<p>Тема 7. Метод Монте-Карло в дослідженні динаміки багаточастинкових систем. Методи генерації випадкових чисел з довільним законом розподілу. Методика вибору мінімальної кількості частинок в системі для визначення її</p>

	<i>властивостей. Необхідність виконання принципу детального балансу при моделюванні. Загальні характеристики моделі решіткового газу.</i>
8	<i>Тема 8. Чисельне інтегрування рівнянь руху частинок в зовнішніх полях часто потребує точного виконання закону збереження її енергії або магнітного моменту. Це не завжди вдається реалізувати внаслідок як похибок різницевої апроксимації рівнянь руху, так і внаслідок похибок обчислень з кінечною кількістю розрядів в представленні чисел. В результаті цього частинки або не виправдано збільшують свою енергію, або «охолоджуються», що може значно спотворити результат моделювання та привести до розробки фізичного обладнання, яке не продемонструє бажаних параметрів. Вказані фіктивні ефекти «розігріву/охолодження» виключені в оригінальних алгоритмах розрахунку траєкторій частинок. Аналогічні «хитрощі» значно спрощують чисельний розв'язок систем рівнянь Шредингера в квантовій механіці.</i>
9	<i>Тема 9. Синтез наноструктур в дифузійному режимі осадження вільних атомів на їх поверхню супроводжується взаємовпливом форми нанокластерів, що формуються, на розподіл густини поверхневих та просторових дифузійних потоків, які, в свою чергу, впливають на еволюцію форми наночастинок в процесі їх синтезу. Вивчення оригінальної Монте-Карло моделі динаміки нанокластерів, яка, як показав досвід її використання, «виловлює» майже всі експериментально знайдені особливості трансформації морфології нанооб'єктів і показала спроможність передбачити нові фізичні ефекти та запропонувати методи керування синтезом впорядкованих наноструктур.</i>

Практичні заняття

<i>№ з/п</i>	<i>Назва теми заняття та перелік основних питань</i>
1	<i>Знайомство з графічним редактором VMD для зображення багатоатомних молекул. Створення видео-файлів для демонстрації структур молекул та динаміки нанооб'єктів.</i>
2-3	<i>Написання власного програмного коду для одновимірного нестационарного рівняння Шредингера. Моделювання процесів тунелювання та надбар'єрного відбиття. Оцінка порогових значень енергії для цих ефектів. Конкурс на кращу презентацію по цій темі в курсі квантової механіки для студентів.</i>
4-5-6	<i>Написання програмного коду для моделювання поширення лазерного променя. Вивчення самовідродження оптичного вихору після відсікання його більшої частини непрозорим екраном. Генерація «доріжки Кармана» оптичних вихорів при комбінації двох співвісних Гаусових променів та при проходженні одного такого променя через дугоподібну щілину. Якісна інтерпретація цього ефекту та відеопрезентація механізму формування цієї доріжки на базі відображення трансформації фазової карти комбінованого променя.</i>
7-8-9	<i>Розробка програмного коду для розрахунку силових ліній напруженості електричного поля системи аксіальних циліндричних електродів з заданими потенціалами. Виконання такого ж завдання для зарядженого кільця, розташованого паралельно провідному напівпростору.</i>

10-11	<i>Стандартні генератори рівномірного розподілу випадкових чисел в інтервалі [0,1]. Періоди повторювання послідовностей квазі-випадкових чисел та штучні фізичні ефекти, які можуть виникати внаслідок квазі-випадковості чисел, що генеруються. Принципи вибору оптимального генератора для задач різного походження для нейтралізації штучних ефектів. Написання коду програми генерування випадкових чисел з довільним законом розподілу. Програма тестування створеного генератора.</i>
12-13-14	<i>Динаміка власного магнітного моменту елементарної частинки в періодичних у часі схрещених зовнішніх магнітних полях. Моделювання продольної та поперечної релаксації внаслідок «шуму» в магнітних полях. Спінове відлуння в магніторезонансній томографії.</i>
15-16	<i>Двовимірна Монте-Карло модель решіткового газу на простій квадратній ґратці. Визначення критичної концентрації атомам для початку формування стійких кластерів. Рівноважна конфігурація кластеру і її відповідність конфігурації Вульфа.</i>
17-18	<i>Фізика розпаду нанодроти на нанокластери. Густина поверхневої енергії на кристалічній грані. Визначення анізотропії цієї густини методом підрахунку розірваних зв'язків. Шороховатий перехід (roughening transition) та його термодинамічні характеристики. Загальна дискусія для пошуку відповіді на наступні питання. 1) Як якісно пояснити спонтанний розвиток шероховатого переходу, якщо при цьому збільшується поверхнева енергія. 2) Як якісно пояснити те, що такий перехід виникає тільки на вибраних гранях кристалічної ґратки. 3) Як можуть впливати на розвиток шероховатого переходу процеси обміну атомами поверхні нанокластера з навколишнім приповерхневим шаром вільних атомів. 4) Якісний аналіз впливу шероховатого переходу на розвиток термічної нестійкості нанодротів</i>

6. Самостійна робота студента/аспіранта

Самостійна робота здобувача наукового ступеня доктора філософії є основним засобом засвоєння навчального матеріалу у вільний від навчальних занять час і включає:

№ з/п	Вид самостійної роботи	Кількість годин СРС
1	Підготовка до аудиторних занять	26
2	Підготовка до МКР	10
3	Підготовка до екзамену	30

Для виконання МКР та закріплення знань, здобутих під час аудиторних занять, аспірантам будуть дані пакети програм розрахунку динаміки поверхні 3-вимірних нанокластерів та нанодротів з різною симетрією кристалічної ґратки, розроблених лекторами та аспірантами КПІ. Загальні принципи побудови цих програм слухачі засвоять на практичних заняттях 2, 3, 6. На базі цих пакетів аспіранти наочно прослідкують цілу низку фізичних процесів, які відкривають несподівані для них самоузгоджені зв'язки між різними фізичними явищами.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які викладач ставить перед аспірантом:

- - правила відвідування занять: відповідно до Наказу 1-273 від 14.09.2020 р. заборонено оцінювати присутність або відсутність здобувача на аудиторному занятті, в тому числі нараховувати заохочувальні або штрафні бали. Відповідно до РСО даної дисципліни бали нараховують за відповідні види навчальної активності на лекційних та практичних заняттях.
- - правила поведінки на заняттях: студент має можливість отримувати бали за відповідні види навчальної активності на лекційних заняттях, передбачені РСО дисципліни. Використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача, в інтернеті, в дистанційному курсі на платформі Сікорський здійснюється за умови вказівки викладача;
- - політика дедлайнів та перескладань: якщо аспірант не проходив або не з'явився на МКР (без поважної причини), його результат оцінюється у 0 балів. Перескладання результатів МКР не передбачено;
- - політика щодо академічної доброчесності: Кодекс честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» <https://kpi.ua/files/honorcode.pdf> встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з дисципліни «*Вибрані методи комп'ютерного аналізу*»;
- - при використанні цифрових засобів зв'язку з викладачем (мобільний зв'язок, електронна пошта, переписка на форумах та у соцмережах тощо) необхідно дотримуватись загальноприйнятих етичних норм, зокрема бути ввічливим та обмежувати спілкування робочим часом викладача.

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

Поточний контроль: опитування за темою заняття та за результатами самостійної роботи, МКР.

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: екзамен.

Умови допуску до семестрового контролю: відсутні.

На першому занятті аспіранти ознайомлюються із рейтинговою системою оцінювання (PCO) дисципліни, яка побудована на основі «Положення про систему оцінювання результатів навчання», https://document.kpi.ua/files/2020_1-273.pdf

Рейтинг аспіранта з дисципліни складається з балів, які він отримує:

- 1) на практичних заняттях;
- 2) за модульну контрольну роботу (МКР);

Система рейтингових балів

1) Практичні заняття. Ваговий коефіцієнт дорівнює 8 за кожний власноручно написаний програмний код. Максимальна кількість балів, які може отримати аспірант на практичних заняттях становить $6 \times 8 = 48$ бали. Нарахування балів за один програмний код:

- відмінні відповіді з глибоким розумінням фізичного ефекту, що вивчається - 8 балів;
- дуже добрі, добрі відповіді 6 бали;
- задовільні, достатні відповіді 4 бали.

2) Модульна контрольна робота (МКР). Ваговий коефіцієнт дорівнює 12. Максимальна кількість балів за контрольну роботу становить $1 \times 12 = 12$ балів. Нарахування балів за контрольну роботу:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90 % потрібної інформації) 11-12 балів;

- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75 % потрібної інформації або незначні неточності) 9-10 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60 % потрібної інформації та деякі помилки) 7-8 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь (менше 60 % потрібної інформації) 0.

3) Екзамен. Завдання містить два теоретичні питання, кожне з яких оцінюються у 20 балів. Всього $2 \times 20 = 40$ балів. Нарахування балів за екзаменаційну відповідь:

- повна відповідь (не менше 90 % потрібної інформації) 36-40 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75 % потрібної інформації) 30-35 балів;
- неповна відповідь (не менше 60 % потрібної інформації) 24-29 балів;
- незадовільна відповідь (менше 60 % потрібної інформації) 0.

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

Якщо аспірант у підсумку набрав 60 балів і більше, але хоче підвищити свою рейтингову оцінку, то він може це зробити у співбесіді з викладачем.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на семестровий контроль:

1. Рівняння в часткових похідних параболічного типу в явищах переносу речовини, квантовій механіці, оптиці, електродинаміці. Методи чисельного розв'язку квазілінійних рівнянь такого типу.
2. Апроксимація диференційних рівнянь на різнецевій сітці. Методика оцінок похибок апроксимації. Проблеми стійкості обчислень при інтегруванні диференційних рівнянь.
3. Різницева схема Кранка-Ніколса для рівнянь параболічного типу. Метод прогонки пошуку розв'язку системи лінійних рівнянь для трьох-діагональних матриць. Похибки методу.
4. Чисельний розв'язок квазі-лінійних диференційних рівнянь. Метод змінних напрямків для рівнянь параболічного типу.
5. Хвильовий пакет в оптиці, акустиці та квантовій механіці. Особливості його трансформації в різних середовищах.
6. Методи чисельного розв'язку нестационарного рівняння Шредингера. Фізична інтерпретація ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання.
7. Параксіальне наближення для опису поширення лазерного променя. Довжина Релея. Сингулярні оптичні промені, топологічний заряд оптичного вихора.
8. Обертальний момент оптичного вихора. Фізичні засади методів його генерації. Чисельна модель розповсюдження вихора в неоднорідних середовищах.
9. Принцип роботи плазмової лінзи, основні припущення при моделюванні її роботи. Методика моделювання particles-in-cells. Вибір шагу моделювання по часу. Оцінка

мінімальної густини частинок в системі для задовільної коректності кінцевого результату.

10. Алгоритми розрахунку електричного та магнітного полів на прикладі плазмової лінзи. Методи формування рівнянь для густини електричного заряду на електродах системи та густини поверхневих струмів намагнічування на її магнітних елементах.
11. Динаміка спінів в зовнішніх магнітних полях. Принципи магніторезонансної мікроскопії: продольна та поперечна релаксація.
12. Алгоритми моделювання динаміки спінових систем. Спінова дифузія та спінове відлуння.
13. Методи Монте-Карло для дослідження динаміки багаточастинкових систем. Методи молекулярної динаміки. Модель решіткового газу.
14. Умова детального балансу в Монте-Карло моделях та методика контролю його виконання.
15. Принципи побудови Монте-Карло моделі для розрахунку трансформації форми наночастинок. Відповідність моделі законам термодинаміки.
16. Кінетика розпаду нанодропу на нанокластери. Роль анізотропії густини поверхневої енергії в формуванні періоду цього розпаду.
17. Моделювання синтезу наночастинок в дифузійному режимі. Фактори керування процесом синтезу для формування нанокластерів з наперед заданою формою.
18. Фізичні механізми, які є рушійними силами «шероховатого переходу». Термодинаміка цього переходу. Причини його виникнення тільки на вибраних гранях кристалу.

Сертифікати проходження дистанційних чи онлайн курсів за відповідною тематикою можуть бути зараховані за умови виконання вимог, наведених у НАКАЗІ № 7-177 ВІД 01.10.2020 Р. «Про затвердження положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті».

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено професором кафедри загальної фізики та моделювання фізичних процесів доктором фіз.-мат. наук, професором Горшковим В'ячеславом Миколайовичем

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 06-23 від 07.06.2023 р.)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 27. 06.2023 р.)