



МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	<i>Е Природничі науки, математика та статистика</i>
Спеціальність	<i>Е5 Фізика та астрономія</i>
Освітня програма	<i>Фізика</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 (120), 16 лекцій, 16 практичних., 88 - срс</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік, модульна контрольна робота</i>
Розклад занять	<i>https://schedule.kpi.ua/</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лектор : д.ф.-м.н., Герасимов Олег Іванович, gerasymovoleg@gmail.com Практичні: д.ф.-м.н., Герасимов Олег Іванович, gerasymovoleg@gmail.com</i>
Розміщення курсу	<i>Посилання на методичне забезпечення: https://classroom.google.com/c/ODE5ODc5NTk3ODkx?cjc=bvnf4uzx</i>

Програма навчальної дисципліни

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

Навчальна дисципліна «Моделювання динаміки багаточастинкових систем» належить до циклу професійної підготовки здобувачів освітньо-наукового рівня доктора філософії за спеціальністю Е5 «Фізика та астрономія». **Метою** навчальної дисципліни є формування у здобувачів здатності розробляти та застосовувати математичні й комп'ютерні моделі динаміки багаточастинкових систем, обирати адекватні методи чисельного моделювання, аналізувати фізичні механізми колективної поведінки частинок, оцінювати достовірність результатів досліджень та використовувати сучасні програмні засоби і високопродуктивні обчислення для розв'язання складних наукових задач у галузі фізики та математичного моделювання. **Предметом** навчальної дисципліни є теоретичні основи, математичні моделі, чисельні методи та сучасні комп'ютерні технології моделювання динаміки багаточастинкових систем, а також методи аналізу, верифікації, валідації та інтерпретації результатів моделювання, необхідні для виконання самостійних наукових досліджень у галузі фізики та астрономії. **Завданнями** цієї навчальної дисципліни є формування у здобувачів знань щодо фізичних основ, математичних моделей і чисельних методів моделювання динаміки багаточастинкових систем, набуття практичних навичок комп'ютерного моделювання, аналізу, верифікації, валідації та інтерпретації результатів чисельних досліджень, використання сучасного програмного забезпечення й високопродуктивних обчислень, а також застосування отриманих знань під час виконання самостійних наукових досліджень і розв'язання складних наукових задач.

Навчальна дисципліна формує у здобувачів наступні *загальні та фахові компетентності*:

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність генерувати нові ідеї (креативність)

ЗК03. Здатність розв'язувати комплексні наукові проблеми на основі системного наукового світогляду та загального культурного кругозору із дотриманням професійної етики та академічної доброчесності.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність виявляти, ставити та вирішувати проблеми дослідницького характеру в сфері фізики та/або астрономії, інтегрувати знання з різних галузей, оцінювати та забезпечувати якість виконуваних досліджень.

ФК06. Здатність застосовувати сучасні методи, методики, технології, інструменти та обладнання для проведення прикладних та фундаментальних наукових досліджень у галузі фізики та/або астрономії.

Після засвоєння навчальної дисципліни здобувачі мають продемонструвати такі **програмні результати навчання**:

ПРН01 Мати сучасні концептуальні та методологічні знання з фізики та/або астрономії та дотичних до них міждисциплінарних напрямів, а також необхідні навички, достатні для проведення фундаментальних і прикладних наукових досліджень з метою отримання нових знань та/або здійснення розробок та інновацій.

ПРН04 Формулювати і перевіряти гіпотези; використовувати для обґрунтування висновків належні докази, зокрема, результати теоретичних і експериментальних досліджень, математичного моделювання, комп'ютерного експерименту, а також наявні літературні дані..

ПРН05 Розробляти моделі процесів і систем у фізиці та/або астрономії та дотичних міждисциплінарних напрямках, використовувати їх у науково-дослідницькій діяльності для отримання нових знань та/або створення розробок та інноваційних продуктів.

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

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

Отримані практичні навички та засвоєні теоретичні знання під час вивчення навчальної дисципліни можна використовувати в подальшому для виконання прикладних і фундаментальних наукових досліджень, що формують нові природничо-наукові знання, а також для аналізу результатів, отриманих під час написання дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Фізичні основи моделювання багаточастинкових систем.

Тема 2. Математичні моделі динаміки багаточастинкових систем

Тема 3. Дискретні та континуальні моделі багаточастинкових середовищ

Тема 4. Чисельні методи дослідження динаміки багаточастинкових систем

Тема 5. Моделювання гранульованих і дисперсних середовищ

Тема 6. Самоорганізація та колективні явища у багаточастинкових системах

Тема 7. Верифікація, валідація та аналіз результатів моделювання

Тема 8. Сучасні підходи до моделювання багаточастинкових систем та перспективи їх розвитку

4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Подчашинський Ю.О., Чепюк Л.О., Воронова Т.С. та ін. Математичні та програмні засоби моделювання інформаційно-вимірювальних систем: навчальний посібник. Житомир: Державний університет «Житомирська політехніка», 2024. 162 с.

2. Герасимов, О. І. (2022) Фізика складних нерівноважних систем та процесів: монографія. Одеський державний екологічний університет, Одеса.

3. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*.

3rd ed. Amsterdam: Elsevier, 2023. 1040 p.

4. Ніколюк П.К. *Моделювання систем: навчальний посібник*. Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса, 2023. 286 с.

5. Alavi S. *Molecular Simulations: Fundamentals and Practice*. Weinheim: Wiley-VCH, 2023. 624 p.

Додаткова література:

7. Герасимов О. І., Співак А. Я. Впакування та стисливість бікомпонентних мікромеханічних (гранульованих) систем. *Український фізичний журнал*. 2025. Т. 70, № 8. С. 550-556. URL: <http://jnas.nbu.gov.ua/article/UJRN-0001603454>

8. Павленко П.М., Філоненко С.Ф., Чередніков О.М., Трейтак В.В. *Математичне моделювання систем і процесів: навчальний посібник*. Київ: Національний авіаційний університет, 2017. 392 с.

9. Shen W., Zhou T., Shi X. Enhanced sampling in molecular dynamics simulations and their latest applications: A review. *Nano Research*. 2023. Vol. 16(12). P. 13474–13497

10. Zhao J., Zhao S., Luding S. The role of particle shape in computational modelling of granular matter. *Nature Reviews Physics*. 2023. Vol. 5. P. 505–525.

11. Tahmasebi, P. (2023). A state-of-the-art review of experimental and computational studies of granular materials: Properties, advances, challenges, and future directions. *Progress in materials science*, 138, 101157.

12. Agarwal, M., Pasupathy, P., Wu, X., Recchia, S. S., & Pelegri, A. A. (2024). *Multiscale computational and artificial intelligence models of linear and nonlinear composites: A review*. *Small Science*, 4(5), Article 230018

13. Pražnikar, E., Ljubič, M., Perdih, A., & Borišek, J. (2024). *Machine learning heralding a new development phase in molecular dynamics simulations*. *Artificial Intelligence Review*, 57, Article 102

14. Zhao, C., Zhou, J., Zhong, K., Bai, Y., & Qi, L. (2024). *Enhancing understanding of metal matrix composites through molecular dynamics simulation: A comprehensive review*. *Computational Materials Science*, 239, Article 112993

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У межах дисципліни заплановано проведення лекційних і практичних занять та самостійної роботи здобувачів. Теми дисципліни взаємозв'язані, матеріал вивчається в логічній послідовності. На лекційних заняттях розкриваються найбільш суттєві теоретичні питання, які забезпечують здобувачам можливість глибокого самостійного вивчення всього програмного матеріалу. Теми та порядок виконання практичних занять сформовано в логічній послідовності і повністю узгоджуються з метою дисципліни. Лекційні та практичні знання поглиблюються шляхом самостійної роботи з використанням рекомендованої літератури та глобальної мережі Internet. Заняття проводяться у комп'ютерній лабораторії (у разі очного режиму навчання) та із застосуванням програми для віддаленого доступу до ПК у лабораторії через Anydesk (у разі дистанційного режиму навчання). Лекції проводяться у вигляді презентації теоретичного матеріалу з використанням мультимедійного проектора або у Zoom (у разі дистанційного режиму навчання). Практичні заняття з відповідної теми проводяться з використанням ПК. Модульна контрольна робота проводиться у комп'ютерній лабораторії. Велика частина методичних матеріалів міститься у вищевказаній методичній літературі.

Лекційні заняття

№ з/п	Назва теми та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів з посиланням на літературу)
1	Вступне заняття. Фізичні основи моделювання багаточастинкових систем <i>Ознайомлення з РСО. Поняття та класифікація багаточастинкових систем. Фізичні принципи опису їх динаміки. Дискретні і континуальні підходи до моделювання. Закони збереження та взаємодія між частинками. Сучасні напрями застосування моделювання багаточастинкових систем.</i> Базова література: [2-5] Додаткова література: [7, 10-13]
2	Математичні моделі динаміки багаточастинкових систем <i>Математичний опис багаточастинкових систем. Рівняння руху та їх класифікація. Детерміновані й стохастичні моделі динаміки. Початкові та граничні умови математичних моделей. Аналіз адекватності та області застосування моделей.</i> Базова література: [1-5] Додаткова література: [8-14]
3	Дискретні та континуальні моделі багаточастинкових середовищ <i>Дискретні моделі багаточастинкових систем. Континуальні моделі та їх математичний опис. Переваги й обмеження дискретного та континуального підходів. Перехід між дискретними і континуальними моделями. Приклади застосування моделей у фізичних дослідженнях.</i> Базова література: [2-5] Додаткова література: [7, 10-12, 14]
4	Чисельні методи дослідження динаміки багаточастинкових систем <i>Методи чисельного інтегрування рівнянь руху. Алгоритми моделювання динаміки багаточастинкових систем. Оцінка точності та стійкості чисельних методів. Методи верифікації та валідації результатів моделювання. Використання сучасних програмних засобів для чисельного моделювання.</i> Базова література: [1, 3-5] Додаткова література: [8, 9, 12-14]
5	Моделювання гранульованих і дисперсних середовищ <i>Фізичні властивості гранульованих і дисперсних середовищ. Математичні моделі гранульованих систем. Особливості моделювання контактної взаємодії частинок. Процеси переносу та колективної динаміки в дисперсних середовищах. Практичні застосування моделей гранульованих і дисперсних систем.</i> Базова література: [2, 3, 5] Додаткова література: [7, 10, 11, 14]
6	Самоорганізація та колективні явища у багаточастинкових системах <i>Механізми самоорганізації у багаточастинкових системах. Колективна поведінка та кооперативні явища. Нелінійна динаміка і формування просторово-часових структур. Математичне моделювання процесів самоорганізації. Приклади самоорганізації в природних і технічних системах.</i> Базова література: [2-5] Додаткова література: [7, 10-13]
7	Верифікація, валідація та аналіз результатів моделювання <i>Принципи верифікації та валідації математичних моделей. Методи оцінювання точності та достовірності результатів моделювання. Аналіз похибок і чутливості моделей. Статистична обробка та інтерпретація результатів моделювання. Представлення та візуалізація результатів комп'ютерного моделювання.</i> Базова література: [1, 3, 4] Додаткова література: [8, 9, 12-14]
8	Сучасні підходи до моделювання багаточастинкових систем та перспективи їх розвитку <i>Сучасні тенденції розвитку моделювання багаточастинкових систем. Високопродуктивні обчислення та паралельні алгоритми моделювання. Методи машинного навчання у дослідженні багаточастинкових систем. Мультифізичне та багатомасштабне моделювання. Перспективи розвитку математичного і комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем.</i> Базова література: [3-5] Додаткова література: [8, 9, 12-14]

Практичні заняття

№ з/п	Назва теми (перелік завдань, які виконуються під керівництвом викладача)
1	Постановка задач моделювання багаточастинкових систем Формулювання фізичної задачі. Вибір параметрів системи. Аналіз початкових і граничних умов. Побудова спрощеної математичної моделі.
2	Математичний опис динаміки багаточастинкових систем Побудова систем рівнянь руху. Визначення сил взаємодії між частинками. Аналіз параметрів моделей та їх фізичного змісту.
3	Реалізація дискретних і континуальних моделей Побудова дискретних та континуальних моделей. Порівняння результатів моделювання. Аналіз областей застосування різних підходів.
4	Чисельне моделювання багаточастинкових систем Реалізація чисельних алгоритмів інтегрування рівнянь руху. Дослідження впливу кроку інтегрування на точність і стійкість розрахунків.
5	Моделювання гранульованих і дисперсних середовищ Комп'ютерне моделювання систем взаємодіючих частинок. Аналіз контактної взаємодії та колективної поведінки гранульованих середовищ.
6	Дослідження процесів самоорганізації у багаточастинкових системах Моделювання процесів самоорганізації. Аналіз формування впорядкованих структур та еволюції багаточастинкових систем.
7	Аналіз, верифікація та валідація результатів моделювання Оцінювання точності чисельних результатів. Аналіз похибок. Порівняння результатів моделювання з експериментальними або літературними даними.
8	Комплексне дослідження багаточастинкової системи сучасними методами моделювання Виконання комплексного комп'ютерного моделювання. Аналіз отриманих результатів. Візуалізація даних і підготовка висновків щодо ефективності застосованої моделі.

6. Самостійна робота здобувача

№ з/п	Назва теми , що виноситься на самостійне опрацювання (завдання на СРС)	Кількість годин СРС
1	Опрацювання теоретичного матеріалу за темою «Фізичні основи моделювання багаточастинкових систем»	8
2	Вивчення математичних моделей динаміки багаточастинкових систем та аналіз наукових публікацій	10
3	Опрацювання дискретних і континуальних моделей багаточастинкових систем	10
4	Самостійне вивчення чисельних методів моделювання та сучасних алгоритмів розрахунків	12
5	Аналіз моделей гранульованих і дисперсних середовищ за матеріалами сучасних наукових досліджень	10
6	Самостійне дослідження процесів самоорганізації та колективних явищ у багаточастинкових системах	10
7	Опрацювання методів верифікації, валідації та аналізу результатів комп'ютерного моделювання	10

8	Вивчення сучасних програмних засобів і технологій моделювання багаточастинкових систем	8
9	Підготовка до модульної контрольної роботи	10

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Правила відвідування занять

Здобувачам рекомендується відвідувати заняття.

Правила поведінки на заняттях

Під час занять здобувачі можуть використовувати засоби зв'язку для пошуку інформації по темі заняття в мережі Інтернет.

Правила захисту самостійних та домашніх контрольних робіт здобувачів

Виконані самостійні роботи здобувачі завантажуються у відповідні розділи дистанційного курсу або надсилаються на електронну пошту викладача.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів

Виконання завдання підвищеної складності + 2 бали за кожне

Політика дедлайнів та перескладань

Дедлайн захисту СРС — 2 тижні після видачі завдання.

Дедлайн захисту модульної контрольної роботи — останнє за розкладом заняття.

Політика щодо академічної доброчесності

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

Норми етичної поведінки здобувачів і працівників визначені у розділі 2 Кодексу честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського».

Детальніше: <https://kpi.ua/code>.

Процедура оскарження результатів контрольних заходів

Здобувачі мають можливість порушити будь-яке питання, яке стосується процедури контрольних заходів, та очікувати, що воно буде розглянуто відповідно до наперед визначених процедур. Здобувачі мають право оскаржити результати контрольних заходів, але обов'язково аргументовано, пояснивши, з яким критерієм вони не погоджуються відповідно до оціночного листа та/або зауважень.

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

Поточний контроль: самостійна робота здобувачів, модульна контрольна робота

Самостійну роботу здобувачів сформовано таким чином, що її завдання сприяють розвитку навичок самостійного наукового пошуку, критичного аналізу сучасних досліджень, математичного та комп'ютерного моделювання складних фізичних систем, аналізу й інтерпретації результатів чисельних експериментів, що є важливим для виконання власних наукових досліджень та підготовки дисертаційної роботи. Модульна контрольна робота проводиться у формі письмової роботи, що містить теоретичні питання та ситуаційні (розрахунково-аналітичні) завдання з моделювання багаточастинкових систем.

Семестровий контроль: залік**Умови допуску до семестрового контролю.**

Виконані завдання на практичних заняттях

Виконана модульна контрольна робота

Система рейтингових балів

Рейтингова оцінка здобувача складається з балів, отриманих здобувачем за результатами заходів поточного контролю, а також із заохочувальних і штрафних балів.

Здобувачі, які виконали всі умови допуску до заліку та мають рейтингову оцінку 60 і більше балів, отримують відповідну до набраного рейтингу оцінку без додаткових випробувань.

Зі здобувачами, які виконали всі умови допуску до заліку та мають рейтингову оцінку менше 60 балів, а також з тими здобувачами, які бажають підвищити свою рейтингову оцінку, на останньому за розкладом занятті з дисципліни в семестрі проводиться семестровий контроль у вигляді залікової контрольної роботи (тест у дистанційному курсі). Рейтингова оцінка, у разі виконання залікової контрольної роботи, визначається як сума балів за залікову контрольну роботу (максимально 80 балів) та балів за модульну контрольну роботу (максимально 20 балів).

Розрахунок шкали рейтингу:

№ з/п	Контрольний захід семестр	%	Ваговий бал	Кіль-ть	Всього
1	Виконання завдань на практичних заняттях	40	5	8	40
2	Виконання домашніх завдань	40	5	8	40
3	Модульна контрольна робота	20	20	1	20
	Всього				100

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 (освітнього компонента).**Перелік питань, які виносяться на залік.**

1. Поняття, класифікація та основні характеристики багаточастинкових систем.
2. Фізичні принципи опису динаміки багаточастинкових систем.
3. Дискретний та континуальний підходи до моделювання багаточастинкових систем.
4. Закони збереження у математичному моделюванні багаточастинкових систем.
5. Математичні моделі динаміки багаточастинкових систем та сфери їх застосування.
6. Рівняння руху багаточастинкових систем та особливості їх побудови.
7. Детерміновані та стохастичні моделі багаточастинкових систем.

8. Початкові та граничні умови в задачах моделювання.
9. Дискретні моделі багаточастинкових систем.
10. Континуальні моделі багаточастинкових систем.
11. Методи чисельного інтегрування рівнянь руху.
12. Оцінювання точності, збіжності та стійкості чисельних методів.
13. Метод дискретних елементів (DEM): принципи та сфери застосування.
14. Метод молекулярної динаміки та його використання для дослідження багаточастинкових систем.
15. Особливості моделювання гранульованих і дисперсних середовищ.
16. Моделювання контактної взаємодії частинок.
17. Самоорганізація та колективні явища у багаточастинкових системах.
18. Нелінійні ефекти та формування просторово-часових структур.
19. Верифікація та валідація математичних моделей.
20. Методи аналізу похибок і оцінювання достовірності результатів моделювання.
21. Методи статистичної обробки та інтерпретації результатів чисельного моделювання.
22. Засоби візуалізації результатів комп'ютерного моделювання.
23. Сучасні програмні комплекси для моделювання багаточастинкових систем.
24. Високопродуктивні обчислення та паралельні алгоритми в моделюванні.
25. Методи машинного навчання у моделюванні багаточастинкових систем.
26. Мультифізичне та багатомасштабне моделювання.
27. Основні тенденції розвитку математичного та комп'ютерного моделювання багаточастинкових систем.
28. Перспективи використання моделювання багаточастинкових систем у сучасних наукових дослідженнях.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено професором, д.ф.-м.н. **Герасимовим Олегом Івановичем**

Ухвалено кафедрою загальної фізики та моделювання фізичних процесів (протокол № 06-26 від 24.06.2026)

Погоджено Методичною комісією фізико-математичного факультету (протокол № 11 від 26.06.2026)