

УДК 53:004.9

DOI 10.36910/6775-2313-5352-2021-19-17

Никируй Л.І.¹, Федосов С.А.², Яремій І.П.¹, Замурусва О.В.², Федосов В.С.³, Сахнюк П.В.⁴¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника²Волинський національний університет імені Лесі Українки³Сервіс-груп «SEOtodo»⁴ТОВ «Mirko Solutions»

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ

Стаття аналізує публікації авторитетних світових і українських науковців в області комп'ютерної фізики для розуміння закономірності щодо підтримки та розвитку цього напрямку у світі та в Україні і визначити перспективи для спільних досліджень. Розглянуто особливості міжнародної співпраці, окреслено коло провідних видань у науковій області, проаналізовано фактори впливовості вчених різних країн на розвиток цієї області. Дослідження базується на результатах даних, опублікованих у міжнародній наукометричній базі Scopus. Виконано аналіз і сформульовано рекомендації для покращення поширення результатів вітчизняних вчених у світовій науковій спільноті за цим напрямком.

Ключові слова: комп'ютерна фізика, публікації, наукові дослідження, h-індекс.

Вступ. Чисельні розрахунки фізичних властивостей напівпровідникових матеріалів електронної техніки і подальше моделювання конструкції пристроїв (сенсорів, сонячних, термо-, фото- елементів та ін.) на їх основі на даний час становлять значний науковий інтерес [1]. Застосування чисельного моделювання для симуляції розширених вимірювань на складних структурах, проектування та оптимізація передових конструктивних рішень для реалізації у сучасному напівпровідниковому приладобудуванні відкриває можливість зменшення часу та затрат на проведення дороговартісних експериментів [2]. Все більшої актуальності набувають дослідження, які є на стику різних наук, наприклад, фізика і електроніка, фізика і інформатика (комп'ютерні науки), тощо. Це є наслідком нових викликів, коли перед науковцями ставляться завдання, де потрібно знаходити нові рішення, використовуючи дослідницькі бази інших наук. Тому закономірним є виникнення нових міжгалузевих напрямків, серед яких: відновлювальна енергетика, комп'ютерна фізика, мехатроніка, тощо. Отже, для отримання конкурентних наукових результатів і підготовки фахівців високого рівня, важливим є аналіз проблем у таких перехресних областях різних наук.

Методологія досліджень. Проведено аналіз публікацій, індексованих у наукометричній базі Scopus з пошуку за ключовими словами (тегом) «Computer physics» (Комп'ютерна фізика) у ключових словах (keywords) наукових статей за період 1993-2021 рр. Вибірку зроблено за результатом аналізу таких матеріалів: найбільш цитованих публікацій із афіліацією у світі, найновіших публікацій із афіліацією в світі та, аналогічно, із афіліацією в Україні. Аналізувалися: афіліація авторів, країни авторів, наявність фінансової підтримки досліджень, журнал, у якому здійснено публікацію, рік публікації та їх кількість, а також і самі публікації. Така методика була запропонована і апробована у [3-5].

Аналіз результатів. У наукометричній базі даних Scopus за період 1993-2021 рр. опубліковано 20 879 документів, що відповідають критерію пошуку «Computer physics» (Комп'ютерна фізика). Сумарний h-індекс для них складає $h = 262$. Більше третини всіх робіт (рис. 1) опубліковано вченими з США. Серед країн-лідерів, також: Німеччина, Китай, Великобританія, Франція, Італія, Японія тощо. Самі ж дослідження з даної тематики зосереджено у провідних науково-дослідних центрах, серед яких: *Європейська організація з ядерних досліджень* (Швейцарія), *Китайська академія наук*, *Національний центр наукових досліджень CNRS* (Франція) і (усі із США) *Массачусетський технологічний інститут*, *Національна прискорювальна лабораторія ім. Енріко Фермі*, *Національна лабораторія ім. Лоуренса в Берклі* тощо. Закономірно, що провідні центри належать саме країнам-лідерам.

Для науковців з українських організацій кількість публікацій присвячених проблемам комп'ютерної фізики значно менша ніж загальносвітова – 149 із h-індексом 18. Провідними українськими установами за кількістю публікацій, які пов'язані з дослідженнями в області комп'ютерної фізики є (кількість публікацій у Scopus): *Національна академія наук України* (41), *Вінницький національний технічний університет* (20), *Національний науковий центр*

«Харківський фізико-технічний інститут» (17), Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут ім. Ігоря Сікорського» (11), Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, Національний університет «Львівська політехніка» (по 6), а також інститути НАН України – Інститут ядерних досліджень (9), Інститут фізики (6) та ін.

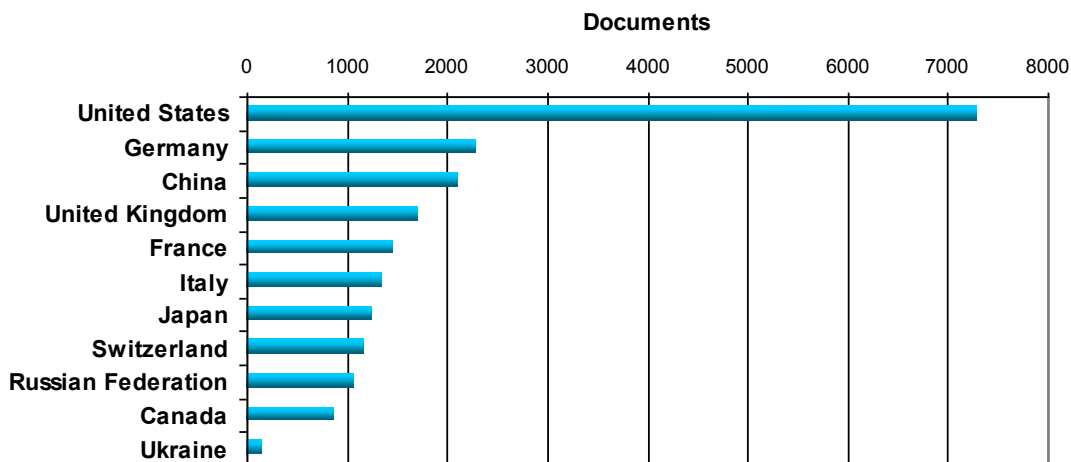


Рис. 1. Діаграма країн із найбільшою кількістю публікацій та України з «Computer physics» (Комп'ютерна фізика).

У найцитованіших публікаціях розглядаються найактуальніші результати досліджень науковців. Аналіз публікацій за тегом «Computer physics» (Комп'ютерна фізика) вказує на високе практичне значення таких досліджень. Зокрема, найбільш цитована публікація у світі (15 078 цитувань) вивчає широкий спектр функціональних можливостей набору інструментів GEANT4 для імітації проходження частинок через речовину [6]. Даний інструментарій є результатом всесвітньої співпраці фізиків та інженерів програмного забезпечення і був використаний у фізиці елементарних частинок, ядерній фізиці, проектуванні прискорювачів, космічній техніці та медичній фізиці. Найцитованіші публікації з комп'ютерної фізики присвячені розгляду теоретичних основ (3D) топологічних ізоляторів і надпровідників, а також перспектив створення пристроїв на їх основі [7] (11 885 цитувань), розробці та впровадженні методу для моделювання структурної релаксації та молекулярної динаміки [8] (9 551 цитувань), удосконаленню універсального та дуже добре оптимізованого пакета GROMACS 3.0 для молекулярного моделювання [9]. Розширення програми для моделювання поверхні ван-дер-ваальської молекули білка [10] дозволяє кількісно оцінити доступність атомів або груп атомів до молекул розчинника або розчиненої речовини певного розміру. У [11] авторами запропоновано методи використання зворотнього зв'язку від фотодетекторів і стійкі до помилок від втрати фотонів та неефективності детектора для розробки квантових комп'ютерів. Тобто, це публікації, які мають чітке практичне спрямування, однак містять також і повний спектр фундаментальних досліджень.

Найбільш цитовані публікації українських вчених мають місце у співавторстві з колегами із Польщі [12], Швеції [13], США і Вірменія [14], Франції, Іспанії тощо. Найцитованіші роботи науковців України присвячено опису механізмів створення химерних станів через появу одиночних станів [12], покращення методу при моделюванні жорсткої поліатомності [15], розробці аналітичного підходу для випадку слабого електромеханічного зв'язку [13], за допомогою аналізу та чисельного моделювання водню та натрію у [14] показано високу ймовірність можливості перенесення атомної заселеності, використовуючи двофотонний комбінаційний перехід із затримкою імпульсів.

Серед найбільш цитованих світових наукових центрів (науковців публікації, яких найбільш цитовані) спостерігаються, в основному, установи країн-лідерів: *Принстонський і Пенсільванський* (США), *Кембриджський* (Великобританія), *Мадридський автономний* (Іспанія), *Гронінгенський* (Нідерланди) *університети*, *Королівський технологічний інститут і Упсальський університет* (Швеція) та ін. Хоча ці центри не входять до переліку провідних науково-дослідних центрів за найбільшою кількістю публікацій, проте науковці з них можуть претендувати на найвищі позиції у рангу світових вчених. В Україні також є ряд центрів з

найавторитетнішими (найцитованішими) науковцями в області комп'ютерної фізики – інститути НАН України: *Інститут математики і Центр з медико-біотехнічних досліджень*, *Інститут конденсованих систем*, *Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна* та ін.

Найвагоміші результати досліджень світових науковців опубліковано у авторитетних виданнях (табл. 1), тоді як найбільш цитовані статті опубліковані у топових (з високим SJR) журналах: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A* (SJR 0,75), *Reviews of Modern Physics* (SJR 24,88), *Journal of Physics: Condensed Matter* (SJR 0,91), *Journal of Molecular Modeling* (SJR 0,36), *Nature* (SJR 15,99). Причому, значна кількість публікацій видана не лише у топових журналах, але й у великій кількості матеріалів конференцій, таких як *Proceedings of SPIE The International Society for Optical Engineering* (SJR 0,19), *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record* та ін., що вказує на важливість участі науковців у роботі таких заходів та представлення на них своїх результатів.

Таблиця 1.

Порівняльна характеристика світових та українських джерел публікацій (країна (SJR)) результатів досліджень в області комп'ютерної фізики (Computer physics)

Світ	Україна
<i>Journal of Physics: Conference Series</i> , UK (Q4 0,21)	<i>Proceedings of SPIE The International Society for Optical Engineering</i> , US (0,19)
<i>Physical Review Letters</i> , US (Q1 3,69)	<i>CEUR Workshop Proceedings</i> , US (0,18)
<i>Proceedings of SPIE The International Society for Optical Engineering</i> , US (0,19)	<i>Journal of Physics: Conference Series</i> , UK (Q4 0,29)
<i>Computer Physics Communications</i> , NL (Q1 1,32)	<i>Computer Physics Communications</i> , NL (Q1 1,32)
<i>IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record</i> , US	<i>Journal of Physics: Condensed Matter</i> , UK (Q1 0,91)

Невисоке значенням h-індексу для України пов'язане не лише з кількістю публікацій. Є країни, які мають майже таку ж їх кількість, але випереджають нас за якістю (h-індексом). Для пояснення цього проаналізовано видання, де представлені дослідження наших вчених. Українські науковці найчастіше публікують свої результати (табл. 1) у матеріалах конференцій, хоча і значну їх кількість опубліковано у виданнях Q1: *Computer Physics Communications* (SJR 1,32), *Journal of Physics: Condensed Matter* (SJR 0,91). Привертає увагу те, що країни-лідери за кількістю і якістю статей публікують результати своїх досліджень практично у тих самих наукових виданнях. Публікуючи статті у таких самих журналах, вчені цих країн звертають увагу на інші праці, опубліковані у цих виданнях. Таким чином реалізується більша кількість цитувань їх праць. Тому найбільш цитовані українські публікації саме у виданнях Q1 і Q2. Причому, імпакт-фактори цих журналів не завжди є надто високими: *Journal of Instrumentation* (Q1 SJR 0,74), *Physical Review E* (Q1 SJR 0,9), *Physica B* (Q2 SJR 0,49), *Optics Communications* (Q2 SJR 0,63), *Physical Review A* (SJR Q1 1,39), *Physical Review Letters* (Q1 SJR 3,69). Часто такими виданнями є матеріали профільних конференцій, що є ознакою сформованого певного міжнародного наукового середовища, представники якого беруть спільно участь у міжнародних конференціях та симпозіумах, де діляться своїми результатами.

Дещо складніше робити висновки за галузю знань, з якою позиціонується певна публікація. Для всіх публікацій по світу пов'язаних з «Комп'ютерна фізика» (Computer physics), переважаючими є галузі «Фізика та астрономія», «Інженерія», «Комп'ютерні науки», «Математика» і «Матеріалознавство» (рис. 2а). Для України переважаючі галузі такі ж як у світі (рис. 2б), лише з чіткіше вираженим спрямуванням публікацій за цими областями, і на інші галузі припадає лише 6,1 %, тоді як у світі – 26,5 %. Це показує про значно ширше використання комп'ютерної фізики у різних прикладних сферах. Дещо інші світові відсоткові значення кількості публікацій проти українських пов'язаних з галузями знань «Фізика та астрономія» (29,3 і 28,1 %), «Інженерія» (15,9 і 18,6 %), «Комп'ютерні науки» (13,9 і 18,3 %). Тоді як для галузей «Математика» (7,6 проти 13,1 %) і «Матеріалознавство» (6,8 проти 15,8 %) спостерігається значний «перекос». Перевага за кількістю публікацій галузі «Фізика та астрономія» вказує на те, що відповідні дослідження більше інтегровані саме до конкретних областей фізики або астрономії і перейшли у практичне русло, яке пов'язане з інженерією,

інформатику, матеріалознавством тощо. Це пояснюється значним фундаментальним доробком і розвитком прикладних аспектів. Часто такі напрями визначаються наявною матеріальною базою або публікаціями у співпраці вчених з різних країн, де кожна наукова група чітко виконує свою частину роботи.

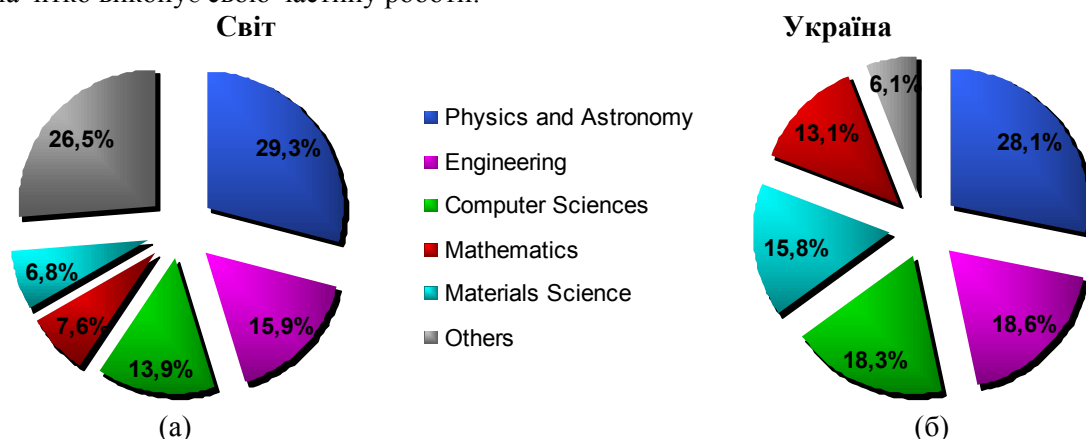


Рис. 2. Переважаючі галузі знань публікацій з «Комп'ютерна фізика» (Computer physics).

Схожим є аналіз країн, з представниками яких частіше йдуть на співпрацю. Для України це країни, які мають можливість надати матеріальну базу високого рівня. Закономірно бачити значну кількість публікацій з: Польща – 33 спільних публікацій, Казахстан – 24, Німеччина та РФ по 11. Є серед країн-партнерів і США, Франція, Італія, Швейцарія, Великобританія. Хоча США має високий економічний потенціал та суттєво вищі показники за кількістю публікацій (рис. 1), вона не є переважаючим серед країн-партнерів для України. Як правило, для цієї країни пріоритетною є підтримка власних досліджень та, відповідно, значна кількість публікацій без іноземних партнерів.

Найбільшими світовими організаціями, що фінансують дослідження в даній галузі – здебільшого організації з США (табл. 2): *National Science Foundation, U.S. Department of Energy, National Natural Science Foundation of China, National Institutes of Health, European Commission* тощо. Для України ситуація з державною підтримкою складніша. Дуже мало публікацій, де вказано виконання за сприянням *НАНУ* і *МОНУ*. Зате є значна кількість публікації українських вчених, дослідження яких підтримані (табл. 2): *European Commission* (Бельгія), *Government of Canada* і *Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada* (Канада) тощо. Як правило, українські вчені виконують свої дослідження або в закордонних інституціях, в рамках дослідницького гранту, або українська організація співпрацює із закордонною. Тому вчені є співавторами багатьох спільних статей. Іншою проблемою у науковців з України є не деталізація на метаданих (відсутність спонсора), або виконання досліджень без фінансової підтримки. Як наслідок, із проіндексованих публікацій з українськими науковцями менше третини мають відомості про фінансування дослідження.

Таблиця 2.

Порівняльна характеристика організації, що фінансують дослідження світових та українських вчених в області комп'ютерної фізик (Computer physics)

Світ	Україна
<i>National Science Foundation</i>	<i>European Commission</i>
<i>U.S. Department of Energy</i>	<i>Government of Canada</i>
<i>National Natural Science Foundation of China</i>	<i>Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada</i>
<i>National Institutes of Health</i>	<i>Russian Foundation for Basic Research</i>
<i>European Commission</i>	<i>AUTO21 Network of Centres of Excellence</i>
<i>U.S. Department of Health and Human Services</i>	<i>Agence Nationale de la Recherche</i>
<i>Deutsche Forschungsgemeinschaft</i>	<i>Canada Research Chairs</i>
<i>Engineering and Physical Sciences Research Council</i>	<i>Chemical Sciences, Geosciences, and Biosciences Division</i>
<i>Seventh Framework Programme</i>	<i>Consiglio Nazionale delle Ricerche</i>
<i>U.S. Department of Defense</i>	<i>Delta</i>

Висновки. Аналіз стану досліджень з комп'ютерної фізики в світі та Україні однозначно свідчить про високу актуальність і перспективність даного напрямку та підтверджується великою кількістю зацікавлених науковців і їх публікацій – 20 879 документів у наукометричній базі даних Scopus за період 1993-2021 рр. з сумарним h-індексом ($h = 262$). Така активність вчених провідних країн світу до даної проблематики обумовлена високим її практичним значенням і використанням у різних сферах. Недостатнє представлення публікацій, які подаються українськими науковцями пояснено: потребами у наявності сучасної та дорогої матеріальної бази, ліцензованого програмного забезпечення, частою відсутністю зовнішнього фінансування таких досліджень, відсутністю чіткого інформування, за кошти яких організацій виконується дослідження. Однак, міжнародна співпраця українських вчених заслуговує уваги та вказує на перспективи розвитку досліджень у напрямі комп'ютерної фізики.

Інформаційні джерела

1. Morales-Acevedo A., Hernández-Como N., Casados-Cruz G. Modeling solar cells: a method for improving their efficiency. *Mater. Sci. Eng. B.* 2012. Vol. 177, № 16. P. 1430–1435.
2. Saliy Ya.P. Yavorskyi R.S. The redistribution modeling of implanted impurity stimulated by vacancies. *Mater. Today: Proc.* 2021. Vol. 35, № 4. P. 576–578.
3. Nykyruy L., Fedosov S., Saliy Ya., Prokopiv V., Zamurujeva O., Yavorskyi R. Current research in the field of medical physics: Challenges for Ukraine. *Scientific Notes.* 2020. № 69. P. 82–91.
4. Wisz G., Nykyruy L., Yakubiv V., Hryhoruk I., Yavorskyi R. Impact of advanced research on development of renewable energy policy: Case of Ukraine. *Int. J. Renewable Energy Res.* 2018. Vol. 8, № 4. P. 2367–2384.
5. Nykyruy L.I., Zamurujeva O.V., Urban O.A., Fedosov S.A. The Impact of Scientific Research on the Development of Renewable Energy. *Perspective Technologies and Devices.* 2020. № 16. P. 82–91.
6. Agostinelli S., Allison J., Amako K., et al. GEANT4 - A simulation toolkit. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A.* 2003. Vol. 506, № 3. P. 250–303.
7. Hasan M.Z., Kane C.L. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.* 2010. Vol. 82, № 4. P. 3045–3067.
8. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., et al. The SIESTA method for *ab initio* order-N materials simulation. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. Vol. 14, № 11. P. 2745–2779.
9. Lindahl E., Hess B., van der Spoel D. GROMACS 3.0: A package for molecular simulation and trajectory analysis. *J. Mol. Model.* 2001. Vol. 7, № 8. P. 306–317.
10. Lee B., Richards F.M. The interpretation of protein structures: Estimation of static accessibility. *J. Mol. Biol.* 1971. Vol. 55, № 3. P. 379–380. (IN3,381-398, IN5,399-400).
11. Knill E., Laflamme R., Milburn G.J. A scheme for efficient quantum computation with linear optics. *Nature.* 2001. Vol. 409, № 6816. P. 46–52.
12. Jaros P., Maistrenko Y., Kapitaniak T. Chimera states on the route from coherence to rotating waves. *Phys. Rev. E.* 2015. Vol. 91, № 2. 022907.
13. Isacsson A., Gorelik L.Y., Voinova M.V., et al. Shuttle instability in self-assembled Coulomb blockade nanostructures. *Physica B.* 1998. Vol. 255, № 1–4. P. 150–163.
14. Yatsenko L.P., Unanyan R.G., Bergmann K., Halfmann T., Shore B.W. Population transfer through the continuum using laser-controlled Stark shifts. *Opt. Commun.* 1997. Vol. 135, № 4–6. P. 406–412.
15. Omelyan I.P. On the numerical integration of motion for rigid polyatomics: the modified quaternion approach. *Computers in Physics.* 1998. Vol. 12, № 1. P. 97–103.

Никируй Л.І.¹, Федосов С.А.², Яремий І.П.¹, Замуруєва О.В.², Федосов В.С.³, Сахнюк П.В.⁴

¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

²Волынский национальный университет имени Леси Украинки

³Сервис-груп «SEOtodo»

⁴ТОВ «Mirko Solutions»

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ФИЗИКИ

© Никируй Л.І.¹, Федосов С.А.², Яремий І.П.¹, Замуруєва О.В.², Федосов В.С.³, Сахнюк П.В.⁴

Статья анализирует публикации авторитетных мировых и украинских ученых в области компьютерной физики для понимания закономерности поддержки и развития этого направления в мире и в Украине и определить перспективы для совместных исследований. Рассмотрены особенности международного сотрудничества, очерчен круг ведущих изданий в научной области, проанализированы факторы влияния ученых разных стран на развитие этой области. Исследование основывается на результатах данных, опубликованных в международной наукометрической базе Scopus. Выполнен анализ и сформулированы рекомендации по улучшению распространения результатов отечественных ученых в мировой научной общности по этому направлению.

Ключевые слова: компьютерная физика, публикации, научные исследования, h-индекс.

Никируй Л.І.¹, Fedosov S.A.², Yaremiy I.P.¹, Zamurujeva O.V.², Fedosov V.S.³, Sakhnyuk P.V.⁴

¹Vasyl Stefanyk Precarpathian National University

²Lesya Ukrainka Volyn National University

³«SEOtodo» service groups

⁴LLC «Mirko Solutions»

CURRENT PROBLEMS OF COMPUTER PHYSICS

The article analyzes the publications of authoritative world and Ukrainian scientists in the field of computer physics to understand the patterns of support and development of this area in the world and in Ukraine and to identify prospects for joint research. The peculiarities of international cooperation are considered, the range of leading publications in the scientific field is outlined, the factors of influence of scientists of different countries on the development of this field are analyzed. The study is based on the results of data published in the international scientometric database Scopus. The analysis is made and recommendations for improvement of distribution of results of domestic scientists in the world scientific community in this area are formulated.

Keywords: computer physics, publications, scientific research, h-index.