

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 27.10.2023 15:15:00

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования**

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Компьютерное моделирование материалов и процессов

Закреплена за подразделением

Кафедра физического материаловедения

Направление подготовки

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Квалификация

Инженер-исследователь

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 8

аудиторные занятия

51

самостоятельная работа

57

Распределение часов дисциплины по семестрам

| Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>) | 8 (4.2) | | Итого | |
|---|---------|-----|-------|-----|
| | Неделя | | | |
| Вид занятий | УП | РП | УП | РП |
| Лекции | 17 | 17 | 17 | 17 |
| Лабораторные | 17 | 17 | 17 | 17 |
| Практические | 17 | 17 | 17 | 17 |
| Итого ауд. | 51 | 51 | 51 | 51 |
| Контактная работа | 51 | 51 | 51 | 51 |
| Сам. работа | 57 | 57 | 57 | 57 |
| Итого | 108 | 108 | 108 | 108 |

Программу составил(и):

кфмн, доцент, Жуков Дмитрий Геннадьевич

Рабочая программа

Компьютерное моделирование материалов и процессов

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС» по направлению подготовки 22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ (приказ от 28.06.2023 г. № 292 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, 22.03.01-БМТМ-23_6-ПП.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.06.2023, протокол № 5-23

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.06.2023, протокол № 5-23

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра физического материаловедения

Протокол от 29.06.2023 г., №11-06

Руководитель подразделения Савченко Александр Григорьевич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

| | |
|-----|---|
| 1.1 | Софрмировать компетенции, предусмотренные учебным планом, и дать понимание методов математического и компьютерного моделирования процессов, определяющих свойства и применение материалов |
|-----|---|

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

| | | |
|------------|---|------------|
| Блок ОП: | | Б1.В.ДВ.22 |
| 2.1 | Требования к предварительной подготовке обучающегося: | |
| 2.1.1 | Материалы для биомедицины | |
| 2.1.2 | Междисциплинарные задачи материаловедения | |
| 2.1.3 | Методы испытания магнитных материалов | |
| 2.1.4 | Мехатроника | |
| 2.1.5 | Нanomатериалы в современной твердотельной электронике | |
| 2.1.6 | Порошковая металлургия и процессы обработки материалов | |
| 2.1.7 | Спектрофотометрические методы оценки качества кристаллов | |
| 2.1.8 | Физика и техника высоких давлений | |
| 2.2 | Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее: | |
| 2.2.1 | Высокотемпературные и сверхтвердые покрытия | |
| 2.2.2 | Дифракционные и микроскопические методы | |
| 2.2.3 | Дифракционные методы исследования неупорядоченных структур | |
| 2.2.4 | Кристаллы в квантовой электронике | |
| 2.2.5 | Магнитомягкие материалы: технологии получения и обработки | |
| 2.2.6 | Неразрушающий контроль и методы диагностики материалов | |
| 2.2.7 | Огнеупорные материалы | |
| 2.2.8 | Оптические элементы лазерных систем | |
| 2.2.9 | Основы физической, биоорганической и коллоидной химии | |
| 2.2.10 | Углеродные, углерод-углеродные и углерод-карбидокремниевые материалы | |
| 2.2.11 | Управление качеством материалов и экспертиза металлопродукции | |
| 2.2.12 | Фазовые превращения при получении металлов и соединений | |
| 2.2.13 | Алмазные поликристаллические материалы | |
| 2.2.14 | Гибридные наноструктурные материалы | |
| 2.2.15 | Магнитные свойства функциональных материалов | |
| 2.2.16 | Магнитотвердые материалы: технологии получения и обработки | |
| 2.2.17 | Медицинская химия | |
| 2.2.18 | Металловедение реакторных материалов | |
| 2.2.19 | Нелинейные кристаллы | |
| 2.2.20 | Солнечная энергетика | |
| 2.2.21 | Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.22 | Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.23 | Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.24 | Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.25 | Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.26 | Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.27 | Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы | |
| 2.2.28 | Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы | |

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

| |
|---|
| ПК-5: Способен осуществлять и обосновывать рациональный выбор материалов и технологических процессов при разработке технологии производства материалов различного назначения |
| Знать: |
| ПК-5-33 методы работы с источниками научно-технической информации для поиска информации об отдельных определениях, понятиях и терминах, термодинамических и физических величинах с целью их применения в практических ситуациях |

| |
|---|
| ПК-5-32 области применения различных методов моделирования, их преимущества, недостатки и ограничения. |
| ПК-5-31 Основные методы и алгоритмы моделирования материалов и процессов |
| Уметь: |
| ПК-5-У3 Использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов; |
| ПК-5-У2 обосновывать наиболее вероятные механизмы протекания процессов в различных условиях изготовления и эксплуатации металлов и сплавов в заданных условиях. |
| ПК-5-У1 применять методы моделирования для анализа структурного состояния металлов и сплавов и способов управления им; |
| Владеть: |
| ПК-5-В2 Навыком использования моделей явлений для прогнозирования поведения материалов при технологических процессах их производства; расчетов термодинамических и кинетических характеристик мартенситных и диффузионных процессов, магнитных превращений; |
| ПК-5-В1 навыками расчетов температур кинетики фазовых превращений; пластической и упругой деформации в том числе и в нелинейной области; кинетики упорядочения и разупорядочения; распада твердых растворов, расчета диаграмм фазового равновесия; |

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

| Код занятия | Наименование разделов и тем /вид занятия/ | Семестр / Курс | Часов | Формируемые индикаторы компетенций | Литература и эл. ресурсы | Примечание | КМ | Выполняемые работы |
|-------------|---|----------------|-------|------------------------------------|------------------------------|------------|----|--------------------|
| | Раздел 1. Молекулярная динамика | | | | | | | |
| 1.1 | Методы численного интегрирования уравнений движения, используемые в молекулярной динамике: алгоритм Верле в скоростной форме, метод Бимана-Шофилда. /Лек/ | 8 | 4 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3Л3.1 | | | |
| 1.2 | Погрешности методов численного интегрирования, их проявление и способы минимизации и учета. /Лек/ | 8 | 3 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4Л2.2Л3.1 | | | |
| 1.3 | Потенциалы межатомного взаимодействия: кубический, Ленарда-Джонса, Ми, понятие о потенциале погруженного атома. Простейшая двухатомная модель твердого тела, теоретические оценки физических и механических свойств, постоянная Грюнайзена, ангармонический осциллятор /Пр/ | 8 | 4 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р4 |
| 1.4 | Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели. /Пр/ | 8 | 4 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р5 |

| | | | | | | | | |
|------|--|---|----|---|---------------------------------|--|--|-----|
| 1.5 | Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение /Пр/ | 8 | 4 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р6 |
| 1.6 | Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора /Лаб/ | 8 | 1 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.1 Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р7 |
| 1.7 | Сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р8 |
| 1.8 | Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р9 |
| 1.9 | Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.6Л2.2Л3.1 | | | Р10 |
| 1.10 | Подготовка домашнего задания 1 /Ср/ | 8 | 14 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 ПК-5-У1 ПК-5-У2 ПК-5-У3 ПК-5-В1 ПК-5-В2 | Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 Э2 | | | |
| | Раздел 2. Методы Монте-Карло | | | | | | | |
| 2.1 | Метод Монте-Карло и алгоритм Метрополиса для моделирования атомных перемещений. /Лек/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.3Л2.1Л3.1 Э1 | | | |
| 2.2 | Клеточные автоматы и модель решеточного «газа». Моделирование диффузии в сплавах /Лек/ | 8 | 4 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.5Л2.2Л3.1 | | | |
| 2.3 | Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок /Пр/ | 8 | 3 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.1Л2.2Л3.1 | | | Р11 |
| 2.4 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.1Л2.2Л3.1 | | | Р12 |
| 2.5 | Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа» /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.1Л2.2Л3.1 | | | Р14 |
| 2.6 | Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа» /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.1Л2.2Л3.1 | | | Р13 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|----|---|--|--|--|-----|
| 2.7 | Подготовка домашнего задания 3 /Ср/ | 8 | 16 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 ПК-5-У1 ПК-5-У2 ПК-5-У3 ПК-5-В1 ПК-5-В2 | Л1.3 Л1.5Л2.2Л3. 1 Э2 | | | |
| 2.8 | Подготовка домашнего задания 2 /Ср/ | 8 | 16 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 ПК-5-У1 ПК-5-У2 ПК-5-У3 ПК-5-В1 ПК-5-В2 | Л1.2 Л1.4 Л1.5Л2.2Л3. 1 Э2 | | | |
| Раздел 3. Геометрические фазовые переходы, перколяция и фракталы | | | | | | | | |
| 3.1 | Модель агрегации, ограниченной диффузией. Понятие фрактала. Модель перколяции как геометрический фазовый переход. /Лек/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.7Л2.2Л3. 1 | | | |
| 3.2 | Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 ПК-5-У3 | Л1.7Л2.2Л3. 1 | | | P15 |
| Раздел 4. Моделирование диаграмм фазового равновесия | | | | | | | | |
| 4.1 | Принципы и методы моделирования диаграмм фазового равновесия. Модели твердых и жидких растворов /Лек/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.6Л2.2Л3. 1 | | | |
| 4.2 | Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия /Пр/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.6Л2.2Л3. 1 | | | P16 |
| 4.3 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Лаб/ | 8 | 2 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 | Л1.3Л2.2Л3. 1 | | | P17 |
| 4.4 | подготовка к итоговой контрольной работе /Ср/ | 8 | 11 | ПК-5-31 ПК-5-32 ПК-5-33 ПК-5-В2 ПК-5-В1 ПК-5-У1 ПК-5-У2 ПК-5-У3 | Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6 Л1.7Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 | | | КМ1 |

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

| Код КМ | Контрольное мероприятие | Проверяемые индикаторы компетенций | Вопросы для подготовки |
|--------|-------------------------|------------------------------------|------------------------|
|--------|-------------------------|------------------------------------|------------------------|

| | | | |
|---|-----------------------------|---|---|
| КМ1 | Итоговая контрольная работа | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У1;ПК-5-У2;ПК-5-У3;ПК-5-В1;ПК-5-В2 | <p>Как в модели молекулярной динамики построить зависимость (распределение) скоростей атомов $n(v)$, где n – доля атомов, имеющих скорость в интервале от v до $v+dv$. Изучить влияние температуры на кривые распределения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики "измерить" коэффициент линейного расширения при низких температурах и при температуре близкой к температуре плавления. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики "измерить" скорость движения одиночной дислокации. Ответ дать как в приведенных единицах, так и в обычной системе единиц измерения для типичного металла. Изучить влияние температуры на эту скорость.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в одной плоскости скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций одного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики исследовать характер взаимодействия двух одиночных дислокаций противоположного знака, находящихся в разных плоскостях скольжения.</p> <p>Как в модели молекулярной динамики установить значения параметров межатомного потенциала, при которых 2-мерная решетка устойчива в "треугольной" и "квадратной" сингонии.</p> <p>Как в модели решеточного газа построить зависимость равновесной концентрации вакансий от температуры.</p> <p>Как в модели решеточного газа построить зависимость плотности газа, находящегося в равновесии с конденсированной фазой, от температуры.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых двухфазная смесь самопроизвольно превращается в твердый раствор двух компонентов</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых твердый раствор двух компонентов самопроизвольно превращается в двухфазную смесь.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых разупорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно упорядочивается.</p> <p>Как в модели решеточного газа предложить критерий конденсации/сублимации и определить соответствующую температуру.</p> <p>Как в модели решеточного газа определить условия, при которых упорядоченный твердый раствор двух компонентов самопроизвольно разупорядочивается. Как в модели решеточного газа определить условия, при которых устойчиво следующее фазовое состояние: газ из компонента В и кристалл на основе компонента А, покрытый слоем адсорбированных атомов В.</p> |
| 5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.) | | | |
| Код работы | Название работы | Проверяемые индикаторы компетенций | Содержание работы |

| | | | |
|----|---|--|---|
| P1 | <p>Д31 На основе проведения машинного эксперимента моделирующего движение снаряда, брошенного под углом к горизонту φ, определить зависимость длины полета L, высоты H и полной энергии E от шага интегрирования Δt, при известном коэффициенте аэродинамики k. Найти значение L, H и E при $\Delta t = 0$. (Варианты выдаются индивидуально)</p> | <p>ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У1;ПК-5-У2;ПК-5-У3</p> | <p>На основе проведения машинного эксперимента моделирующего движение снаряда, брошенного под углом к горизонту φ, определить зависимость длины полета L, высоты H и полной энергии E от шага интегрирования Δt, при известном коэффициенте аэродинамики k. Найти значение L, H и E при $\Delta t = 0$. (Варианты выдаются индивидуально)</p> |
| P2 | <p>Д32 В модели "Осциллятор" изучить зависимость теплоемкости и коэффициента термического расширения от температуры для потенциала $m \cdot n \cdot c$ (индивидуально) заданными параметрами и сравнить их с аналогичными зависимостями для гармонического потенциала. Учесть погрешности интегрирования при различных температурах. (Варианты выдаются индивидуально)</p> | <p>ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У2;ПК-5-У3</p> | <p>В модели "Осциллятор" изучить зависимость теплоемкости и коэффициента термического расширения от температуры для потенциала $m \cdot n \cdot c$ (индивидуально) заданными параметрами и сравнить их с аналогичными зависимостями для гармонического потенциала. Учесть погрешности интегрирования при различных температурах. (Варианты выдаются индивидуально)</p> |

| | | | |
|----|---|--|---|
| P3 | <p>ДЗЗ В модели "Решеточный газ ($z=4$)" изучить поведение системы при ее переходе из исходного состояния неупорядоченного твердого раствора в стабильное состояние при различных температурах. Изучить - это значит понять почему и какие качественные изменения происходят в системе и придумать как их можно описать количественно, то есть какие зависимости можно и нужно измерять и анализировать. (Варианты выдаются индивидуально)</p> | <p>ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У2;ПК-5-У3</p> | <p>В модели "Решеточный газ ($z=4$)" изучить поведение системы при ее переходе из исходного состояния неупорядоченного твердого раствора в стабильное состояние при различных температурах. Изучить - это значит понять почему и какие качественные изменения происходят в системе и придумать как их можно описать количественно, то есть какие зависимости можно и нужно измерять и анализировать. (Варианты выдаются индивидуально)</p> |
| P4 | <p>Потенциалы межатомного взаимодействия: кубический, Ленарда-Джонса, Ми, понятие о потенциале погруженного атома. Простейшая двухатомная модель твердого тела, теоретические оценки физических и механических свойств, постоянная Грюнайзена, ангармонический осциллятор</p> | <p>ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33</p> | <p>Потенциалы межатомного взаимодействия: кубический, Ленарда-Джонса, Ми, понятие о потенциале погруженного атома. Простейшая двухатомная модель твердого тела, теоретические оценки физических и механических свойств, постоянная Грюнайзена, ангармонический осциллятор</p> |
| P5 | <p>Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели.</p> | <p>ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33</p> | <p>Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели.</p> |

| | | | |
|-----|--|-------------------------|--|
| P6 | Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33 | Начальные и краевые условия в молекулярной динамике. Фазовые превращения в молекулярной динамике: плавление, испарение, мартенситное превращение |
| P7 | Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора | ПК-5-33;ПК-5-32;ПК-5-У1 | Сравнение методов численного интегрирования по разным критериям и влияние шага интегрирования на сохранение энергии в модели нелинейного осциллятора |
| P8 | Сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа | ПК-5-33;ПК-5-У1 | Сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа |
| P9 | Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33 | Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений |
| P10 | Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения | ПК-5-31;ПК-5-33;ПК-5-У1 | Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения |
| P11 | Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33 | Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок |
| P12 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» | ПК-5-32;ПК-5-33 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» |
| P13 | Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа» | ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У2 | Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа» |
| P14 | Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа» | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33 | Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа» |

| | | | |
|-----|---|---------------------------------|---|
| P15 | Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции | ПК-5-31;ПК-5-У1;ПК-5-У3 | Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции |
| P16 | Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия | ПК-5-31;ПК-5-32;ПК-5-33;ПК-5-У1 | Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия |
| P17 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» | ПК-5-31;ПК-5-33;ПК-5-У2;ПК-5-У3 | Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» |

5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

Экзамен по курсу не предусмотрен

5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

По курсу предусмотрен зачет с оценкой. Зачет с оценкой проставляется на основе оценок текущего контроля (трех домашних заданий).

Оценка «отлично» - обучающийся показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы, уверенно действует по применению полученных знаний на практике, грамотно и логически стройно излагает материал при ответе, умеет формулировать выводы из изложенного теоретического материала, знает дополнительно рекомендованную литературу.

Оценка «хорошо» - обучающийся показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, допускает незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильно действует по применению знаний на практике, четко излагает материал.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но уверенно исправляемыми после дополнительных и наводящих вопросов, правильно действует по применению знаний на практике;

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, дает неполные ответы на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «неявка» – обучающийся на зачет с оценкой не явился.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

| | Авторы, составители | Заглавие | Библиотека | Издательство, год |
|------|---|---|------------------------|--|
| Л1.1 | Звонарев С. В., Кортов В. С., Штанг Т. В. | Моделирование структуры и свойств наносистем: учебно-методическое пособие | Электронная библиотека | Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2014 |
| Л1.2 | Данилов Н. Н. | Математическое моделирование: учебное пособие | Электронная библиотека | Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014 |
| Л1.3 | Соболь И. М., Пирогова Г. Я. | Численные методы Монте-Карло: монография | Электронная библиотека | Москва: Наука, 1973 |
| Л1.4 | Иванов В. В., Кузьмина О. В. | Математическое моделирование: учебно-методическое пособие | Электронная библиотека | Йошкар-Ола: Поволжский государственный технологический университет, 2016 |
| Л1.5 | Осипов Юрий Васильевич, Славин Михаил Борисович | Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Диффузия: учеб. пособие | Библиотека МИСиС | М.: Изд-во МИСиС, 2011 |

| | Авторы, составители | Заглавие | Библиотека | Издательство, год |
|------|------------------------------|--|------------------------|------------------------|
| Л1.6 | Юрчук Сергей Юрьевич | Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики: курс лекций | Библиотека МИСиС | М.: Изд-во МИСиС, 2013 |
| Л1.7 | Шихеева Валерия Владимировна | Фрактальная геометрия. Детерминированные фракталы: учебник | Электронная библиотека | М.: Изд-во МИСиС, 2019 |

6.1.2. Дополнительная литература

| | Авторы, составители | Заглавие | Библиотека | Издательство, год |
|------|--|---|------------------------|------------------------|
| Л2.1 | Соболь И. М. | Метод Монте-Карло | Электронная библиотека | Москва: Наука, 1968 |
| Л2.2 | Мак-Лоун Р. Р., Крэггс Дж. У., Нобл Б., др., Эндриус Дж., Мак-Лоун Р. Р. | Математическое моделирование | Библиотека МИСиС | М.: Мир, 1979 |
| Л2.3 | Розин Константин Маркович, Закутайлов Константин Владимирович | Моделирование физических и технологических процессов: учеб. пособие | Электронная библиотека | М.: Изд-во МИСиС, 2009 |

6.1.3. Методические разработки

| | Авторы, составители | Заглавие | Библиотека | Издательство, год |
|------|----------------------------|---|------------------------|--|
| Л3.1 | Губина Т. Н., Тарова И. Н. | Учебно-методическое пособие по дисциплине «Компьютерное моделирование»: учебное пособие | Электронная библиотека | Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2004 |

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

| | | |
|----|--|---|
| Э1 | Dissemination of IT for the Promotion of Materials Science (DoITPoMS). Solid Solutions | https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/solid-solutions/index.php |
| Э2 | Хранилище документации Майкрософт для пользователей, разработчиков и ИТ-специалистов | https://docs.microsoft.com/ru-ru/ |

6.3 Перечень программного обеспечения

| | |
|-----|--------------------------|
| П.1 | Win Pro 10 32-bit/64-bit |
| П.2 | ESET NOD32 Antivirus |
| П.3 | Microsoft Office |

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

| | |
|-----|--|
| И.1 | Полнотекстовые российские научные журналы и статьи: |
| И.2 | — Научная электронная библиотека eLIBRARY https://elibrary.ru/ |
| И.3 | — Полнотекстовые деловые публикации информагентств и прессы по 53 отраслям https://polpred.com/news |
| И.4 | Иностранные базы данных (доступ с IP адресов МИСиС): |
| И.5 | — аналитическая база (индексы цитирования) Web of Science https://apps.webofknowledge.com |
| И.6 | — аналитическая база (индексы цитирования) Scopus https://www.scopus.com/ |
| И.7 | — наукометрическая система InCites https://apps.webofknowledge.com |
| И.8 | — научные журналы издательства Elsevier https://www.sciencedirect.com/ |

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

| Ауд. | Назначение | Оснащение |
|------|------------|-----------|
|------|------------|-----------|

| | | |
|------------------------------------|-------------------|--|
| Б-416 | Учебная аудитория | проектор; экран; маркерная доска; компьютер преподавателя; микроскоп Carl Zeiss Axio Scope A1, компьютерный класс на 12 компьютеров, комплект учебной мебели |
| Б-416 | Учебная аудитория | проектор; экран; маркерная доска; компьютер преподавателя; микроскоп Carl Zeiss Axio Scope A1, компьютерный класс на 12 компьютеров, комплект учебной мебели |
| Читальный зал электронных ресурсов | | комплект учебной мебели на 55 мест для обучающихся, 50 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus. |
| Б-416 | Учебная аудитория | проектор; экран; маркерная доска; компьютер преподавателя; микроскоп Carl Zeiss Axio Scope A1, компьютерный класс на 12 компьютеров, комплект учебной мебели |

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Проведение всех видов занятий осуществляется исключительно в аудиториях, обеспеченных мультимедийным оборудованием, с возможностью показа презентаций и демонстрации компьютерных моделей.

Проведение лабораторных работ осуществляется в специализированной лаборатории (Б-416), в которой возможна индивидуальная работа студентов с компьютерными моделями, при проведении занятий группы разбиваются на подгруппы, численностью обучающихся не более 12 студентов.

Лекционные занятия нацелены на изучение студентами общих вопросов компьютерного моделирования.

Лабораторные и практические занятия должны быть нацелены на практическое изучение различных математических моделей материалов и процессов и особенностей их применения для моделирования.

Предусматриваются домашние задания, включающие задачи активному применению изучаемых компьютерных моделей.

Проведение аудиторных занятий предусматривает использование в учебном курсе активных и интерактивных технологий:

- проведение лекций с использованием интерактивных и мультимедийных технологий (презентация в формате MS PowerPoint);
- использование при проведении занятий специализированной (см. выше) лаборатории с возможностью проведения занятий в интерактивной форме (комплект специального программного обеспечения собственной разработки по моделированию различных процессов и превращений в материалах).

Дисциплина относится к точным наукам и требует значительного объема самостоятельной работы. Отдельные учебные вопросы выносятся на самостоятельную проработку и контролируются посредством текущей аттестации (три домашних задания). При этом организуются групповые и индивидуальные консультации. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе, что поддерживается системой аттестации.

Подготовка домашних заданий работ проводится в часы самостоятельной работы.