

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 12.05.2023 17:25:20

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

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

48

самостоятельная работа

60

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
	УП	РП		
Неделя	12			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	12	12	12	12
Лабораторные	24	24	24	24
Практические	12	12	12	12
Итого ауд.	48	48	48	48
Контактная работа	48	48	48	48
Сам. работа	60	60	60	60
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):
кфмн, доцент, Жуков Д.Г.

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 02.04.2015 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, 22.03.01-БМТМ-22.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра физического материаловедения

Протокол от 11.04.2022 г., №8-04

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.20
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Атомное строение фаз	
2.1.2	Биохимия наноматериалов	
2.1.3	Инженерия поверхности	
2.1.4	Квантовая и оптическая электроника	
2.1.5	Методы исследования физических свойств полупроводниковых структур	
2.1.6	Методы получения наночастиц и наноматериалов	
2.1.7	Мехатроника	
2.1.8	Наноструктурные термоэлектрики	
2.1.9	Основы компьютерной металлографии	
2.1.10	Основы магнетизма. Часть 1. Физика магнетизма	
2.1.11	Основы физики поверхности	
2.1.12	Термодинамика и кинетика аморфизирующихся систем	
2.1.13	Физика и техника высоких давлений, фазовые превращения в углероде и нитриде бора	
2.1.14	Физика полупроводниковых приборов	
2.1.15	Физика прочности	
2.1.16	Физико-химия металлов и неметаллических материалов	
2.1.17	Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы	
2.1.18	Материаловедение	
2.1.19	Материаловедение полупроводников и диэлектриков	
2.1.20	Металловедение инновационных материалов	
2.1.21	Методы исследования материалов	
2.1.22	Метрология и стандартизация цифровых технологий в материаловедении и металлургии	
2.1.23	Метрология и технические измерения функциональных материалов	
2.1.24	Метрология, стандартизация и технические измерения	
2.1.25	Метрология, стандартизация и технические измерения в электронике	
2.1.26	Основы материаловедения и методов исследования материалов	
2.1.27	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.28	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.29	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.30	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.1.31	Разработка новых материалов	
2.1.32	Технология функциональных материалов	
2.1.33	Фазовые равновесия и дефекты структуры	
2.1.34	Физика диэлектриков	
2.1.35	Физика полупроводников	
2.1.36	Введение в квантовую теорию твердого тела	
2.1.37	Дефекты кристаллической решетки	
2.1.38	Компьютеризация эксперимента	
2.1.39	Планирование и организация научно-исследовательской работы	
2.1.40	Планирование научного эксперимента	
2.1.41	Теория поверхностных явлений	
2.1.42	Теория симметрии	
2.1.43	Электроника	
2.1.44	Кристаллография	
2.1.45	Методы математической физики	
2.1.46	Практическая кристаллография	

2.1.47	Физическая химия
2.1.48	Информатика
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-1: Способен осуществлять обработку и анализ научно-технической информации и результатов исследований	
Знать:	
ПК-1-32	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-1-31	области применения различных методов моделирования, их преимущества, недостатки и ограничения.
ОПК-5: Способен решать научно-исследовательские задачи при осуществлении профессиональной деятельности с применением современных информационных технологий и прикладных аппаратно-программных средств, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области	
Знать:	
ОПК-5-31	Основные методы и алгоритмы моделирования материалов и процессов
ПК-1: Способен осуществлять обработку и анализ научно-технической информации и результатов исследований	
Уметь:	
ПК-1-У1	обосновывать наиболее вероятные механизмы протекания процессов в различных условиях изготовления и эксплуатации металлов и сплавов в заданных условиях.
ОПК-5: Способен решать научно-исследовательские задачи при осуществлении профессиональной деятельности с применением современных информационных технологий и прикладных аппаратно-программных средств, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области	
Уметь:	
ОПК-5-У2	Использовать методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов;
ОПК-5-У1	применять методы моделирования для анализа структурного состояния металлов и сплавов и способов управления им;
ПК-1: Способен осуществлять обработку и анализ научно-технической информации и результатов исследований	
Владеть:	
ПК-1-В1	опытом расчетов термодинамических и кинетических характеристик мартенситных и диффузионных процессов, магнитных превращений;
ОПК-5: Способен решать научно-исследовательские задачи при осуществлении профессиональной деятельности с применением современных информационных технологий и прикладных аппаратно-программных средств, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области	
Владеть:	
ОПК-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;
ОПК-5-В2	Навыком использования моделей явлений для прогнозирования поведения материалов при технологических процессах их производства;

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	2	ОПК-5-31 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3Л3.1			
1.2	Погрешности методов численного интегрирования, их проявление и способы минимизации и учета. /Лек/	8	2	ОПК-5-31 ПК-1-31 ПК-1-32	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	ОПК-5-31 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1			Р4
1.4	Бинарная корреляционная функция. Осциллирующие потенциалы. Методы ускорения расчетов и совершенствования модели. /Пр/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32	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	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32	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	4	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1 Л1.6Л2.2Л3.1			Р7
1.7	Сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1			Р8
1.8	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-В1	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1			Р9
1.9	Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ПК-1-В1	Л1.6Л2.2Л3.1			Р10
1.10	Подготовка домашнего задания 1 /Ср/	8	20	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В1 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.2 Л1.4 Л1.6Л2.2Л3.1 1 Э2			Р1

1.11	Подготовка домашнего задания 2 /Ср/	8	20	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.2 Л1.4 Л1.5Л2.2Л3. 1 Э2				P2
	Раздел 2. Методы Монте-Карло								
2.1	Метод Монте-Карло и алгоритм Метрополиса для моделирования атомных перемещений. /Лек/	8	2	ОПК-5-31 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.3Л2.1Л3. 1 Э1				
2.2	Клеточные автоматы и модель решеточного «газа». Моделирование диффузии в сплавах /Лек/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.5Л2.2Л3. 1				
2.3	Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок /Пр/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В2 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.1Л2.2Л3. 1				P11
2.4	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В2 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1Л2.2Л3. 1				P12
2.5	Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа» /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В2 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1Л2.2Л3. 1				P14
2.6	Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа» /Лаб/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-В2 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.1Л2.2Л3. 1				P13
2.7	Подготовка домашнего задания 3 /Ср/	8	20	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-В1	Л1.3 Л1.5Л2.2Л3. 1 Э2				P3
	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	ОПК-5-31 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.7Л2.2Л3. 1				
3.2	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции /Лаб/	8	4	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1 ПК-1-В1	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	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.6Л2.2Л3. 1				

4.2	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия /Пр/	8	2	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ПК-1-31 ПК-1-32	Л1.6Л2.2Л3. 1			Р16
4.3	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа» /Лаб/	8	4	ОПК-5-31 ОПК-5-У1 ОПК-5-У2 ОПК-5-В1 ПК-1-31 ПК-1-32 ПК-1-У1	Л1.3Л2.2Л3. 1		КМ1	Р17

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	Зачет с оценком	ОПК-5-У1;ОПК-5-31;ОПК-5-У2;ОПК-5-В1;ОПК-5-В2;ПК-1-31;ПК-1-32;ПК-1-У1;ПК-1-В1	<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>ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-У2</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 $m-n$ с (индивидуально) заданными параметрами и сравнить их с аналогичными зависимостями для гармонического потенциала. Учесть погрешности интегрирования при различных температурах. (Варианты выдаются индивидуально)</p>	<p>ОПК-5-31;ПК-1-31;ОПК-5-В1;ПК-1-32</p>	<p>В модели "Осциллятор" изучить зависимость теплоемкости и коэффициента термического расширения от температуры для потенциала $m-n$ с (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>ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-В1;ОПК-5-В2;ПК-1-31;ПК-1-32</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>ОПК-5-31;ПК-1-31;ПК-1-32</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>ОПК-5-31</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	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ПК-1-32;ПК-1-31	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	ОПК-5-У1;ОПК-5-31;ПК-1-31	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	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ПК-1-31	Сравнение результатов использования межатомных потенциалов различного типа
P9	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ПК-1-31	Использование бинарной корреляционной функции для изучения фазовых превращений
P10	Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения	ОПК-5-У2;ОПК-5-В1;ПК-1-31;ПК-1-32;ПК-1-У1	Измерения скорости скольжения дислокаций и мартенситного превращения
P11	Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок	ПК-1-31;ПК-1-У1;ПК-1-32	Упорядочение твердых растворов и распад твердых растворов. Коалесценция. Адсорбция и образование пленок
P12	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа»	ОПК-5-31;ОПК-5-У1	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа»
P13	Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа»	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ПК-1-31	Определение кинетики атомного упорядочения твердых растворов в модели решеточного «газа»
P14	Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа»	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-5-В1;ПК-1-У1	Определение кинетики расслоения твердых растворов в модели решеточного «газа»

P15	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции	ОПК-5-У2;ПК-1-У1	Измерение параметров геометрических фазовых переходов в модели перколяции
P16	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия	ОПК-5-31;ОПК-5-В1;ПК-1-31	Алгоритм определения критических точек диаграмм фазового равновесия
P17	Определение температурной зависимости концентрации вакансий в модели решеточного «газа»	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ПК-1-31;ПК-1-У1	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 «не явка» – 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	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 Ю. В., Славин М. Б.	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 С. Ю.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики: курс лекций	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2013
Л1.7	Шихеева В. В.	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., Эндрюс Дж., Мак-Лоун Р. Р.	Математическое моделирование	Библиотека МИСиС	М.: Мир, 1979
Л2.3	Розин К. М., Закутайлов К. В.	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	Иностраные 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 лекций и практических 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.