

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной и научной работе

Дата подписания: 09.07.2023 19:47:31

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)

# Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов

Закреплена за подразделением

Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Направление подготовки

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Квалификация

Магистр-исследователь

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

в том числе:

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

74

Формы контроля в семестрах:

зачет 2

курсовая работа 2

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	2 (1.2)		Итого	
	УП	РП	УП	РП
Неделя	18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лабораторные	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	74	74	74	74
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

*к.ф.-.м.н., ст.преп., Ерохин Сергей Владимирович*

Рабочая программа

**Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов**

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ (приказ от 02.04.2021 г. № 119 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ, 22.04.01-ММТМ-22-4.plx , утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ, , утвержденной Ученым советом НИТУ МИСИС 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

**Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков**

Протокол от 28.06.2021 г., №07/21

Руководитель подразделения Оганов А.Р.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Цель – научить использовать численные методы и компьютерное моделирование для обработки результатов экспериментов в области материаловедения и решения прикладных задач.
-----	--

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.О
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Материаловедение и технологии перспективных материалов	
2.1.2	Методы электронной микроскопии для материалов твердотельной электроники	
2.1.3	Новые углеродные материалы	
2.1.4	Оптические явления в кристаллах. Часть 1	
2.1.5	Тензорные методы в кристаллофизике	
2.1.6	Технология получения кристаллов	
2.1.7	Физические свойства приповерхностных слоев и методы их исследований	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве	
2.2.2	Кристаллические компоненты акустоэлектроники	
2.2.3	Микросхемотехника	
2.2.4	Нanomатериалы в современной твердотельной электронике	
2.2.5	Нелинейные кристаллы	
2.2.6	Оптические элементы лазерных систем. Часть 2	
2.2.7	Солнечная энергетика	
2.2.8	Экономика инновационного производства	
2.2.9	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.10	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ОПК-4: Способен находить и перерабатывать информацию, требуемую для принятия решений в научных исследованиях и в практической технической деятельности, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-4-31 Возможности основных современных методов компьютерного моделирования, области их применимости и методы трактовки химических явлений и процессов
<b>УК-2: Способен интегрировать знания и принимать решения в сложных ситуациях, формулировать суждения на основе неполной или ограниченной информации, управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</b>
<b>Знать:</b>
УК-2-31 Области и способы применения прикладных программных пакетов компьютерной алгебры в моделировании свойств различных материалов.
<b>ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-5-32 Алгоритмы вычисления производных экспериментальных данных численными методами, причины неустойчивости операции численного дифференцирования и способы снижения влияния неустойчивости на результат численного дифференцирования.
ОПК-5-31 Основы численных методов, применяемых для обработки экспериментальных данных
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Знать:</b>
УК-1-31 Причины и физические ограничения использования тех или иных методов компьютерной обработки данных в реальном времени в исследовательских приборах, в том числе при анализе методом преобразования Фурье

УК-1-32 Ограничения возможностей алгоритмов математического и компьютерного моделирования материалов и физических процессов, связанные с дискретностью и конечностью экспериментальных данных, в том числе при анализе спектров
<b>ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-5-У1 Корректно формулировать требования к экспериментальным данным для получения релевантных данных при их дальнейшей математической обработке
<b>ОПК-4: Способен находить и перерабатывать информацию, требуемую для принятия решений в научных исследованиях и в практической технической деятельности, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-4-У2 Применять приемы численного анализа периодических и квазипериодических сигналов в спектроскопии и моделировании материалов.
ОПК-4-У1 Применять численные методы моделирования на основе актуальных литературных данных.
<b>УК-2: Способен интегрировать знания и принимать решения в сложных ситуациях, формулировать суждения на основе неполной или ограниченной информации, управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</b>
<b>Уметь:</b>
УК-2-У1 Подбирать подходящие модели и обосновывать границы их применимости на основе литературных данных
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, выработать стратегию действий</b>
<b>Уметь:</b>
УК-1-У1 Работать со справочной литературой и другими информационными и нормативными материалами в области компьютерных и информационных технологий.
<b>ОПК-5: Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-5-В1 Методами сбора экспериментальных данных с целью их корректной математической обработки.
<b>УК-2: Способен интегрировать знания и принимать решения в сложных ситуациях, формулировать суждения на основе неполной или ограниченной информации, управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</b>
<b>Владеть:</b>
УК-2-В1 Навыками выбора подходящих моделей для описания дискретных, конечных экспериментальных данных, владеть методами статистического моделирования
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, выработать стратегию действий</b>
<b>Владеть:</b>
УК-1-В1 Навыками применения современных методов компьютерного моделирования при решении практических задач и стандартными компьютерными программами, используемыми для этих целей
<b>ОПК-4: Способен находить и перерабатывать информацию, требуемую для принятия решений в научных исследованиях и в практической технической деятельности, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-4-В1 Навыками программирования и алгоритмами численного расчета с помощью программных пакетов компьютерной алгебры

#### 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
	<b>Раздел 1. Основы моделирования</b>							

1.1	Введение в дисциплину «Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов». Алгоритм научных исследований с помощью математического моделирования. /Пр/	2	2	УК-2-31 ОПК-4-31 ОПК-5-31 ОПК-5-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.9			
1.2	Примеры применения математического и компьютерного моделирования для решения задач. Обсуждение границ применимости моделирования. /Лаб/	2	2	УК-2-У1 УК-1-У1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-5-31 ОПК-5-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.7 Л1.9			Р6
	<b>Раздел 2. Численное интегрирование и численное дифференцирование в обработке результатов экспериментов</b>							
2.1	Фундаментальная неустойчивость численного дифференцирования. Численное дифференцирование методами правосторонней, левосторонней и центральной разностей. Численное интегрирование. /Пр/	2	2	УК-1-31 УК-1-32 ОПК-5-31 ОПК-5-32	Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2			
2.2	Лабораторная работа по численному дифференцированию методами правосторонней, левосторонней и центральной разностей и численному интегрированию (часть 1) /Лаб/	2	2	УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ОПК-5-31 ОПК-5-32	Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	Для проведения лабораторной работы требуется специализированная компьютерная лаборатория К-420 с предустановленным программным пакетом MATLAB		Р1
2.3	Лабораторная работа по численному дифференцированию методами правосторонней, левосторонней и центральной разностей и численному интегрированию (часть 2) /Лаб/	2	2	УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ОПК-5-31 ОПК-5-32	Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	Для проведения лабораторной работы требуется специализированная компьютерная лаборатория К-420 с предустановленным программным пакетом MATLAB		Р1

2.4	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку. Выполнение курсовой работы. /Ср/	2	16	ОПК-4-У1 ОПК-5-32 ОПК-5-У1	Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	При выполнении курсовой работы студентам рекомендуется руководствоваться конспектом лекций и методическими указаниями к курсовой работе (см. Приложения к РПД). Самостоятельная работа может проводиться студентами на личных компьютерах или в специализированной аудитории К-420 каф. МПид.		
<b>Раздел 3. Компьютерное моделирование</b>								
3.1	Основы моделирования с помощью эмпирических потенциалов. Точность метода и границы применимости. /Пр/	2	2	УК-2-31 УК-2-У1 ОПК-4-31 ОПК-4-У1	Л1.6			
3.2	Проведение молекулярной динамики с помощью пакета LAMMPS (часть 1) /Лаб/	2	2	УК-1-В1 ОПК-4-31	Л1.6 Э3			Р3
3.3	Проведение молекулярной динамики с помощью пакета LAMMPS (часть 2) /Лаб/	2	1	УК-1-В1 ОПК-4-31	Л1.6 Э3			Р3
3.4	Основы теории функционала электронной плотности. Точность метода и границы применимости. /Пр/	2	2	УК-2-31 УК-2-У1 ОПК-4-31	Л1.6 Л1.10			
3.5	Использование пакета SIESTA для расчёта параметров решётки кристаллов методом теории функционала плотности. (часть 1) /Лаб/	2	2	УК-1-В1 ОПК-4-31	Л1.6 Л1.10 Э1 Э2			Р4
3.6	Использование пакета SIESTA для расчёта параметров решётки кристаллов методом теории функционала плотности. (часть 2) /Лаб/	2	1	УК-1-В1 ОПК-4-31	Л1.6 Л1.10 Э1 Э2			Р4

3.7	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку. Выполнение курсовой работы. /Ср/	2	16	УК-2-31 ОПК-4-31 ОПК-4-У1	Л1.6 Л1.10			
	<b>Раздел 4. Использование преобразования Фурье для анализа и обработки сигналов</b>							
4.1	Ряд Фурье и преобразование Фурье в различных формах записи. Свойства преобразования Фурье и области его применения /Пр/	2	2	УК-2-У1 УК-1-31 ОПК-4-У2 ОПК-5-В1	Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2			
4.2	Ограничения, накладываемые на преобразование Фурье дискретностью и конечностью набора данных /Пр/	2	2	УК-2-В1 УК-1-31 УК-1-32 ОПК-4-У1 ОПК-4-У2 ОПК-5-31	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2			
4.3	Дискретное Фурье-преобразование и алгоритмы вычисления. Быстрое преобразование Фурье. (часть 1) /Лаб/	2	2	УК-2-В1 УК-1-31 УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-У1 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1 ОПК-5-В1	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2			Р2
4.4	Дискретное Фурье-преобразование и алгоритмы вычисления. Быстрое преобразование Фурье. (часть 2) /Лаб/	2	1	УК-2-В1 УК-1-31 УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-У1 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1 ОПК-5-В1	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2			Р2

4.5	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку. Выполнение курсовой работы. /Ср/	2	16	УК-1-31 УК-1-32 ОПК-4-У1 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1 ОПК-5-В1	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	При выполнении курсовой работы студентам рекомендуется руководствоваться конспектом лекций и методическими указаниями к курсовой работе (см. Приложения к РПД). Самостоятельная работа может проводиться студентами на личных компьютерах или в специализированной аудитории К-420 каф. МПид.		
	<b>Раздел 5. Статистическое моделирование. Метод Монте-Карло.</b>							
5.1	Введение в метод Монте-Карло. Области применения статистического моделирования. /Пр/	2	2	УК-2-31 УК-2-У1 УК-2-В1 УК-1-У1 ОПК-4-31	Л1.3 Л1.8			
5.2	Задачи по вычислению площадей и интегралов с помощью метода Монте-Карло в пакете Matlab. /Лаб/	2	2	УК-2-В1 УК-1-В1 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1 ОПК-5-31	Л1.3 Л1.8 Э4			Р5
5.3	Теоретическая подготовка к каждому занятию в соответствии с программой курса, а также изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку. Выполнение курсовой работы. /Ср/	2	16	ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В1	Л1.3 Л1.8			
	<b>Раздел 6. Подготовка к защите курсовой работы</b>							
6.1	Подготовка к защите лабораторных работ. Подготовка к защите курсовой работы. /Ср/	2	10	УК-2-У1 УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.7 Л1.8 Л1.10			
6.2	Защита лабораторных работ. /Пр/	2	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	Проводится на предпредседнем занятии семестра	КМ1	



6.3	Защита курсовой работы /Пр/	2	1	УК-2-У1 УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1	Л1.4 Л1.5 Л1.7Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2	Проводится на последнем занятии семестра	КМ2	
-----	-----------------------------	---	---	------------------------------------	---	--	-----	--

### 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	Защита лабораторных работ	УК-1-31;УК-1-32;УК-1-У1;УК-2-31;ОПК-4-В1;ОПК-4-У2;ОПК-4-У1;ОПК-4-31;ОПК-5-В1;ОПК-5-У1;ОПК-5-32;ОПК-5-31	<p>Вычислить производные и выполнить интегрирование набора экспериментальных данных.</p> <p>Выполнить Фурье-преобразование экспериментальных данных и построить график амплитудного спектра.</p> <p>Написать алгоритм перемножения полиномов чётных степеней с использованием быстрого Фурье преобразования.</p> <p>Рассчитать значения выданных интегралов с необходимой точностью с помощью метода Монте-Карло.</p> <p>Посчитать число <math>\pi</math>, площадь фигуры или интеграл методом Монте-Карло.</p> <p>Смоделировать выданную задачу с помощью пакета lammps/siesta.</p>
КМ2	Защита курсовой работы	ОПК-5-31;ОПК-5-32;ОПК-5-У1;ОПК-5-В1;ОПК-4-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-У2;ОПК-4-В1;УК-2-31;УК-2-У1;УК-2-В1;УК-1-31;УК-1-32;УК-1-У1;УК-1-В1	<p>Вопросы для самоподготовки к защите курсовой работы:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Численное дифференцирование. Правосторонняя, левосторонняя и центральная разности.</li> <li>Доказательство неустойчивости операции численного дифференцирования.</li> <li>Операция свертки, ее физическая интерпретация и свойства.</li> <li>Использование свертки для вычисления преобразования Фурье от произведения двух функций.</li> <li>Ряд Фурье. Свойства, способы записи и области применения.</li> <li>Вывод комплексного представления ряда Фурье.</li> <li>Прямое и обратное преобразования Фурье. Их свойства.</li> <li>Преобразование Фурье гармонической функции (синуса или косинуса).</li> <li><math>\delta</math>-функция Дирака. Получение из sinc-функции. Свойства <math>\delta</math>-функции. Фурье преобразование <math>\delta</math>-функции.</li> <li>Амплитудный и фазовый спектры. Их свойства</li> <li>Влияние на спектр сигнала конечности времени накопления данных.</li> <li>Влияние дискретизации сигнала на получаемый спектр.</li> <li>Вывод DTFT и DFT-преобразований.</li> <li>Моделирование поверхности, молекул и наноструктур. Метод сверхъядейки.</li> <li>Приближение Борна-Оппенгеймера.</li> <li>Поверхность потенциальной энергии. Методы поиска минимума энергии.</li> <li>Обзор эмпирических и полуэмпирических методов. Алгоритм Верле. Метод градиентного спуска.</li> <li>Ab initio методы. Теория функционала электронной плотности. Теория Томаса-Ферми. Самосогласованные уравнения Кона- Шэма.</li> <li>Приближение локальной электронной плотности. Обобщённое градиентное приближение.</li> <li>Метод Монте-Карло. Генераторы псевдослучайных чисел.</li> <li>Алгоритм применения метода Монте-Карло в комбинации с методами молекулярной динамики.</li> </ol>

#### 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	Лабораторная работа №2	ОПК-5-32;ОПК-5-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-В1;УК-1-32;УК-1-В1	Численное дифференцирование методами правосторонней, левосторонней и центральной разностей и численное интегрирование. а) Получить у преподавателя файл с экспериментальными данными б) Численно получить первую и вторую производную экспериментальных данных методами право-, левосторонней и центральной разностей, а также производную от данных, аппроксимированных сплайном. в) Сделать выводы о влиянии шума и дискретности данных на результат численного дифференцирования. г) Провести численное интегрирование экспериментальных данных различными методами и сравнить ошибку с аналитически полученными величинами.
P2	Лабораторная работа №5	УК-1-31;ОПК-5-В1;ОПК-4-У1;ОПК-4-У2;ОПК-4-В1;УК-1-32;УК-1-В1;УК-2-В1	Дискретное Фурье-преобразование и алгоритмы вычисления. Использование Фурье- преобразование в ИК Фурье- спектроскопии. а) Получить у преподавателя файл с экспериментальными данными. б) Вычислить фазовый и амплитудный спектр сигнала. в) Сделать выводы о влиянии шума и затухания сигнала на фазовый и амплитудный спектр сигнала. г) Провести моделирование интерферограммы ИК Фурье спектрометра по заданному спектру.
P3	Лабораторная работа №3	ОПК-4-31;УК-1-В1	Проведение молекулярной динамики с помощью пакета LAMMPS. Облучение материалов ионами. а) Подготовить входной файл для запуска молекулярной динамики в пакете lammps б) Провести динамику облучения материала ионами с различными энергиями. в) Определить пороговые значения энергии ионов для прохождения в кристаллическую решётку материала.
P4	Лабораторная работа №4	ОПК-4-31;УК-1-В1	Использование пакета SIESTA для расчёта параметров решётки кристаллов методом теории функционала плотности. а) Получить у преподавателя структуру кристалла. б) Подготовить входной файл для запуска расчётов с помощью теории функционала плотности в пакете siesta. в) Определить оптимальные параметры решётки и оптимальное положение атомов заданного кристалла путём нахождения минимума энергии.
P5	Лабораторная работа №6	ОПК-5-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-В1;УК-1-В1;УК-2-В1	Задачи по вычислению площадей и интегралов с помощью метода Монте-Карло в пакете Matlab. а) Получить задание у преподавателя. б) Написать на матлабе скрипт для решения задачи с помощью метода Монте-Карло. в) Сравнить результаты с аналитическим решением задачи. Определить погрешность метода в зависимости от размера статистического набора.
P6	Лабораторная работа 1	ОПК-5-31;ОПК-5-У1;ОПК-4-31;ОПК-4-У1;УК-1-У1	Примеры применения математического и компьютерного моделирования для решения задач. Основы программирования на matlab.

P7	Курсовая работа	ОПК-5-31;ОПК-5-32;ОПК-4-31;ОПК-4-У1;ОПК-4-У2;ОПК-4-В1;УК-2-31;УК-2-У1;УК-2-В1;УК-1-31;УК-1-У1;УК-1-В1;УК-1-32	<p>Индивидуальное задание по теме курса, в котором студент применяет полученные знания на практике.</p> <p>В качестве такого задания может быть написание программы на языке matlab, в которой будет реализован функционал для обработки экспериментальных данных, например, аппроксимация экспериментальных данных функцией с использованием нелинейной регрессии, взятие производной и вычисление интеграла от полученной функции, выполнение Фурье преобразования экспериментальных данных</p> <p>Программа должна быть прокомментирована, каждое последующее задание отделено от предыдущего.</p> <p>Программа должна выполняться в среде matlab 2011 года или новее без ошибок.</p> <p>Программа для удобства может быть разбита на отдельные функции, если их файлы и их код приводятся вместе с программой.</p> <p>Также в качестве курсовой работы возможно проведение численного эксперимента в пакетах Lammps и Siesta для получения физических свойств материалов (модуля Юнга, тензора упругих констант, электронной структуры, запрещенной зоны, подвижности носителей и т.д.). В этом случае студент должен обосновать используемые приближения, выбор потенциалов и получить физические величины, согласующиеся с литературными данными.</p>
----	-----------------	---	---

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

экзамен не предусмотрен

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

Зачет по дисциплине ставится по итогам работы студента в семестре. Предполагается следующая шкала оценок:

- а) «зачет» – студент успешно выполнил и защитил все лабораторные работы.  
 б) «незачет» – студент не защитил хотя бы одну лабораторную работу.

Оценка по курсовой работе ставится согласно следующей шкале:

- а) «отлично» – студент показывает глубокие, исчерпывающие знания в объеме пройденной программы и уверенно действует по применению полученных знаний на практике;  
 б) «хорошо» – студент показывает твердые и достаточно полные знания в объеме пройденной программы, но допускает незначительные ошибки при применении знаний на практике;  
 в) «удовлетворительно» – студент показывает знания в объеме пройденной программы, ответы излагает хотя и с ошибками, но использует методы и правила, необходимые для решения конкретной поставленной задачи, правильно действует по применению знаний на практике;  
 г) «неудовлетворительно» – студент допускает грубые ошибки в ответе, не понимает сущности излагаемого вопроса, не умеет применять знания на практике, не использует методы и правила, необходимые для решения конкретной поставленной задачи

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Трусов П. В.	Введение в математическое моделирование: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: Логос, 2004
Л1.2	Диков А. В., Степанова С. В., Сугробов Г. В.	Математическое моделирование и численные методы: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ПГПУ), 2000
Л1.3	Соболь И. М.	Метод Монте-Карло	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1968
Л1.4	Газенаур Е. Г., Кузьмина Л. В., Крашенинин В. И.	Методы исследования материалов: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013
Л1.5	Галушкин Н. Е.	Высокоуровневые методы программирования: язык программирования MatLab: учебник	Электронная библиотека	Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2011

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.6	Киттель Ч.	Введение в физику твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1978
Л1.7	Кошкидько В. Г., Панычев А. И.	Основы программирования в системе MATLAB: учебное пособие	Электронная библиотека	Таганрог: Южный федеральный университет, 2016
Л1.8	Соболевский Н. М.	Метод Монте-Карло в задачах о взаимодействии частиц с веществом: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: Физматлит, 2017
Л1.9	Семенов А. Г., Печерских И. А.	Математическое и компьютерное моделирование: практикум	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2019
Л1.10	Крашенинин В. И., Кузьмина Л. В., Газенаур Е. Г.	Квантовая химия: учебное пособие	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2019

### 6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Мещеряков В. В.	Задачи по статистике и регрессионному анализу с MATLAB	Электронная библиотека	Москва: Диалог-МИФИ, 2009
Л2.2	Ласица А. М.	Использование Matlab и GNU Octave в вычислительной физике: конспект лекций: курс лекций	Электронная библиотека	Омск: Омский государственный технический университет (ОмГТУ), 2017

### 6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1		Моделирование и визуализация экспериментальных данных: лабораторный практикум: учебное пособие	Электронная библиотека	Ставрополь: Северо-Кавказский Федеральный университет (СКФУ), 2018
Л3.2	Гусева Е. Н., Ефимова И. Ю., Коробков Р. И., Коробкова К. В., Ильина Т. В.	Математика и информатика: практикум: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: ФЛИНТА, 2021

### 6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Открытая база данных по кристаллографии (англ.) // Crystallography Open Database: сайт. 2021.	<a href="http://www.crystallography.net/cod/">http://www.crystallography.net/cod/</a>
Э2	Документация к пакету Siesta (англ.)	<a href="https://gitlab.com/siesta-project/siesta/-/releases/v4.1.5/downloads/siesta.pdf">https://gitlab.com/siesta-project/siesta/-/releases/v4.1.5/downloads/siesta.pdf</a>
Э3	Документация к пакету Lammmps (англ.)	<a href="https://guriang.unpad.ac.id/lammpsdoc/Manual.html">https://guriang.unpad.ac.id/lammpsdoc/Manual.html</a>
Э4	Документация к пакету MATLAB (англ.)	<a href="https://www.mathworks.com/help/index.html?s_tid=CRUX_lftnav">https://www.mathworks.com/help/index.html?s_tid=CRUX_lftnav</a>

### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Microsoft Office
П.2	LMS Canvas
П.3	MS Teams
П.4	MATLAB
П.5	Microsoft Excel

### 6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
К-420	Аудитория для самостоятельной работы	стационарные компьютеры - 10 шт., пакет лицензионных программ MS Office, доска аудиторная меловая/маркерная, комплект учебной мебели

Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
Читальный зал №4 (Б)		комплект учебной мебели на 20 рабочих мест, компьютеры с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета

### 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

На практических занятиях в конспект следует заносить всё, что рекомендует преподаватель. Анализ результатов и отработка упражнений, изученных на практических занятиях, экономит время и способствует лучшему усвоению материала.

Студентам рекомендуется с самого начала освоения данного курса работать с литературой и предлагаемыми заданиями в форме подготовки к очередному аудиторному занятию. При этом актуализируются имеющиеся знания, а также создается база для усвоения нового материала, возникают вопросы, ответы на которые студент получает в аудитории.

При освоении данного курса студент должен пользоваться библиотекой вуза, а также электронными базами учебной литературы, в соответствии с настоящей программой.