

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 12.05.2023 17:25:12

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)

# Методы вычислительной физики

Закреплена за подразделением

Кафедра металловедения и физики прочности

Направление подготовки

22.03.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Форма обучения

**очная**

Общая трудоемкость

**4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану

144

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

зачет с оценкой 5

аудиторные занятия

51

курсовая работа 5

самостоятельная работа

93

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	5 (3.1)		Итого	
	Неделя 18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	17	17	17	17
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	51	51	51	51
Контактная работа	51	51	51	51
Сам. работа	93	93	93	93
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

*к.ф.-.м.н., доц., Мельниченко А.С.*

Рабочая программа

**Методы вычислительной физики**

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 металловедения и физики прочности**

Протокол от 17.05.2022 г., №№8

Руководитель подразделения проф. Никулин С.А.

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	Цель – Дать знания об использовании методов вычислительного (компьютерного) эксперимента для решения задач физического материаловедения. Сформировать навыки построения имитационной математической модели физического явления, выбора численного метода, создания алгоритма и компьютерной реализации модели.
-----	--

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

	Блок ОП:	Б1.В.ДВ.07
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Введение в квантовую механику	
2.1.2	Математическая статистика и анализ данных	
2.1.3	Основы дизайна металлических материалов	
2.1.4	Основы квантовой механики	
2.1.5	Физика	
2.1.6	Физическая химия	
2.1.7	Химия	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Защита интеллектуальной собственности и патентоведение	
2.2.2	Коррозия и защита металлов	
2.2.3	Механические свойства материалов	
2.2.4	Научно-исследовательская работа	
2.2.5	Научно-исследовательская работа	
2.2.6	Научно-исследовательская работа	
2.2.7	Научно-исследовательская работа	
2.2.8	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.2.9	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.2.10	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.2.11	Производственная практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности	
2.2.12	Статистическая физика	
2.2.13	Физика металлов	
2.2.14	Физические свойства твердых тел	
2.2.15	Материалы с особыми физическими свойствами	
2.2.16	Металловедение и термическая обработка металлов	
2.2.17	Методы исследования структур и материалов. Часть 1	
2.2.18	Методы исследования физических свойств полупроводниковых структур	
2.2.19	Методы получения наночастиц и наноматериалов	
2.2.20	Методы физико-химических исследований	
2.2.21	Наноструктурные термоэлектрики	
2.2.22	Основы компьютерной металлографии	
2.2.23	Оформление результатов научной деятельности	
2.2.24	Фазовые и структурные изменения при формировании материалов и эпитаксиальных структур	
2.2.25	Физика прочности и механические свойства материалов	
2.2.26	Физические основы деформации и разрушения	
2.2.27	Физическое материаловедение сплавов с особыми магнитными свойствами, часть 1. Магнитно-мягкие сплавы	
2.2.28	Наноматериалы	
2.2.29	Нормы и правила оформления ВКР	
2.2.30	Основы магнетизма. Часть 2. Процессы перемагничивания материалов	
2.2.31	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.32	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.33	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.34	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.35	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	
2.2.36	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы	

2.2.37	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы
2.2.38	Преддипломная практика для выполнения выпускной квалификационной работы
2.2.39	Спектрофотометрические методы оценки качества кристаллов
2.2.40	Технология термической обработки

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

<b>ПК-2: Способен участвовать в проведении экспериментов, расчетов и оформлении результатов исследований</b>	
<b>Знать:</b>	
ПК-2-31 методы моделирования свойств материалов	
<b>ОПК-4: Способен проводить измерения и наблюдения в сфере профессиональной деятельности, обрабатывать и представлять экспериментальные данные</b>	
<b>Знать:</b>	
ОПК-4-31 теоретические основы методов компьютерного моделирования физических задач	
<b>ПК-2: Способен участвовать в проведении экспериментов, расчетов и оформлении результатов исследований</b>	
<b>Уметь:</b>	
ПК-2-У1 выбирать и применять численные модели для моделирования физических процессов в материалах	
<b>ОПК-4: Способен проводить измерения и наблюдения в сфере профессиональной деятельности, обрабатывать и представлять экспериментальные данные</b>	
<b>Уметь:</b>	
ОПК-4-У1 формулировать, и рассчитывать математические модели для исследования явлений в материалах	
<b>ПК-2: Способен участвовать в проведении экспериментов, расчетов и оформлении результатов исследований</b>	
<b>Владеть:</b>	
ПК-2-В1 навыками исследования физических явлений на компьютерных моделях	
<b>ОПК-4: Способен проводить измерения и наблюдения в сфере профессиональной деятельности, обрабатывать и представлять экспериментальные данные</b>	
<b>Владеть:</b>	
ОПК-4-В1 практическими навыками выполнения широкого спектра видов компьютерного анализа материалов и процессов	

### 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. Раздел 1. модели непрерывных процессов							

1.1	движение, колебания, диффузия, молекулярная динамика, решеточная статика /Лек/ /Лек/	5	8	ОПК-4-31	Л1.1Л2.1	используются компьютерные демонстрации: – Видеофильм (компьютерная модель) «Слияние вакансий»; – Видеофильм (компьютерная модель) «Движение дислокации»; ; – Видеофильм (компьютерная модель) «Движение фокусона»; – Видеофильм (компьютерная модель) «Распыление поверхности»; – Видеофильм (компьютерная модель) «Структурное превращение»; ;		
1.2	решение простейших задач (программ) моделей непрерывных процессов /Пр/ /Пр/	5	16	ОПК-4-У1 ОПК-4-В1	Л1.2Л2.1	Практические занятия проводятся в компьютерном классе кафедры.	КМ1	Р1,Р2
1.3	самостоятельное изучение темы "Модели непрерывных процессов" Подготовка к практическим занятиям /Ср/ /Ср/	5	43	ОПК-4-31 ОПК-4-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2	Методические указания по выполнению курсовой работы имеются в электронном виде в компьютерном классе кафедры		
	<b>Раздел 2. Раздел 2. Статистические модели</b>							

2.1	метод Монте-Карло, фазовые переходы, перколяция, соединяющие кластеры /Лек/ /Лек/	5	9	ПК-2-31	Л1.3Л2.3	Используются компьютерные демонстрации: – Видеофильм (компьютерная модель) «Рост частицы новой фазы»; – Видеофильм (компьютерная модель) «Упорядочение в модели Изинга»; – Видеофильм (компьютерная модель) «Образование соединяющего кластера»;		
2.2	Решение задач (составление программ) простейших статистических моделей /Пр/ /Пр/	5	18	ПК-2-У1 ПК-2-В1	Л1.4Л2.4	Практические занятия проводятся в компьютерном классе кафедры.	КМ2	Р3,Р4
2.3	самостоятельное изучение темы "Статистические модели". Подготовка к практическим занятиям. Подготовка к курсовой работе /Ср/ /Ср/	5	50	ПК-2-31 ПК-2-В1	Л1.2 Л1.3Л2.3 Л2.4			

### 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	Контрольная работа №1 по разделу "Моделирование непрерывных процессов"	ОПК-4-31;ОПК-4-В1	1. Роль и место математического моделирования как метода физики твердого тела. 2. Источники ошибок в компьютерных моделях. 3. Интегрирование уравнений движения. 4.Контроль устойчивости решения в физических моделях. 5.Роль граничных условий. 6.Алгоритм молекулярной динамики. 7.Специальные условия задач молекулярной динамики.
КМ2	Контрольная работа №2 по разделу "Статистические модели"	ПК-2-31;ПК-2-У1;ПК-2-В1	1. Генераторы случайных чисел. 2.Монтекарловский цикл. 3.Случайные блуждания. 4.Алгоритм Метрополиса. 5.Моделирование большого канонического ансамбля. 6.Модель Изинга. 7.Фазовые переходы второго рода. 8.Кластеры. 9.Свойства соединяющего кластера 10.Фрактальная размерность соединяющего кластера

<b>5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)</b>			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Практическое занятие. Модели дифференциальных уравнений первого и второго порядка	ОПК-4-У1;ОПК-4-31	исследование сходимости численных моделей непрерывных процессов
P2	Практическое занятие. моделирование тепловых и диффузионных полей	ОПК-4-31	исследование численных решений уравнений в частных производных
P3	Практическое занятие. Векторные и матричные модели	ОПК-4-В1	Применение численных решений векторной и матричной алгебры для дискретных моделей
P4	Практическое занятие. Двумерная модель диффузии	ПК-2-У1	Моделирование диффузии как стохастического процесса
P5	Курсовая работа. Поиск оптимального решения	ОПК-4-31;ОПК-4-В1	Анализ зависимости свойства от параметров процесса и поиск оптимального значения свойства

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

Программой экзамен не предусмотрен

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

Оценка «зачет» ставится обучающемуся, заслужившему оценки "отлично", "хорошо", "удовлетворительно" за все контрольные работы.

Оценка «незачет» - обучающийся получил оценку "неудовлетворительно" хотя бы за одну контрольную работу.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

### 6.1. Рекомендуемая литература

#### 6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Салмина Н. Ю.	Имитационное моделирование: учебное пособие	Электронная библиотека	Томск: Эль Контент, 2012
Л1.2	Терехов Т. Ю., Тарова И. Н., Суздальская Е. А., Масина О. Н.	Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум: учебное пособие	Электронная библиотека	Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2007
Л1.3	Соболь И. М., Пирогова Г. Я.	Численные методы Монте-Карло	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1973
Л1.4	Розин К. М., Закутайлов К. В.	Моделирование физических и технологических процессов: учеб. пособие	Электронная библиотека	М.: Изд-во МИСиС, 2009

#### 6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Матюшкин И. В.	Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Москва: РИЦ Техносфера, 2011

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.2	Кручинин Н. Ю.	Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах: учебное пособие	Электронная библиотека	Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2016
Л2.3	Есина З. Н.	Математическое моделирование фазовых переходов в бинарных растворах: монография	Электронная библиотека	Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2016
Л2.4	Шихеева В. В.	Фрактальная геометрия. Детерминированные фракталы: учебник	Электронная библиотека	М.: Изд-во МИСиС, 2019

### 6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Зернограничная диффузия
П.2	MS Teams
<b>6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных</b>	
И.1	Естественно-научный образовательный портал "Российское образование" <a href="http://en.edu.ru/catalogue/766">http://en.edu.ru/catalogue/766</a>

## 7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
А-221а	Компьютерный класс	ПК-15 шт., моноблок - 1 шт., пакет лицензионных программ MS Office, доска, 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, ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus
Читальный зал №3 (Б)		комплект учебной мебели на 44 места для обучающихся, МФУ Xerox VersaLink B7025 с функцией масштабирования текстов и изображений, 8 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.

## 8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Лекционные занятия нацелены на изучение студентами общих вопросов компьютерного моделирования физических явлений. Практические занятия нацелены на изучение программирования и практическое создание компьютерных моделей физических процессов.

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 компьютерной лаборатории.

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