

## АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Компьютерное моделирование физических процессов»

по основной профессиональной образовательной программе по направлению подготовки  
09.03.01 «Информатика и вычислительная техника» (уровень бакалавриата)

**Направленность (профиль):** Технологии разработки программного обеспечения

**Общий объем дисциплины** – 7 з.е. (252 часов)

**В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы компетенции с соответствующими индикаторами их достижения:**

- ПК-15.1: Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации;
- ПК-15.2: Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ;

**Содержание дисциплины:**

Дисциплина «Компьютерное моделирование физических процессов» включает в себя следующие разделы:

**Форма обучения заочная. Семестр 8.**

**Объем дисциплины в семестре** – 4 з.е. (144 часов)

**Форма промежуточной аттестации** – Экзамен

**1. Методология компьютерного моделирования наносистем.** Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.

**2. Квантовое описание структуры атомного мира.** Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов..

**3. Моделирование строение атомов.** Электронная теория строения атомов. Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности..

**4. Моделирование молекулярных систем..** Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии..

**5. Межмолекулярные взаимодействия.** Межмолекулярные силы. Потенциалы взаимодействия частиц. Молекулярная динамика. Молекулярная механика. Моделирование методами Монте-Карло.

**6. Механизмы образования наноструктур.** Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка.

**7. Многомасштабное моделирование материалов и процессов.** Концепция многомасштабного моделирования. Многомасштабное моделирование энергетических процессов. Моделирование в наноструктурной области. Моделирование макроскопических систем.

**8. Программное обеспечение моделирования наносистем.** Программные компоненты для проведения исследовательских работ при моделирования наносистем. Интегрированные пакеты программ..

**Форма обучения заочная. Семестр 9.**

**Объем дисциплины в семестре** – 3 з.е. (108 часов)

**Форма промежуточной аттестации** – Экзамен

**1. Методы моделирования в физики конденсированного состояния.** Статистическая теория упорядоченности. Потенциалы межатомного взаимодействия. Методы моделирования компьютерных экспериментов. Методика проведения компьютерного эксперимента..

**2. Исследования атомного упорядочения в сплавах со сверхструктурой L12.** Общие сведения об атомном упорядочении сплавов. Атомные механизмы превращений порядок - беспорядок. Факторы влияющие на процесс структурных превращений порядок- беспорядок. Роль компьютерного эксперимента в исследовании теории упорядочения..

**3. Разработка программных компонент для проведения исследовательских работ с помощью компьютерных экспериментов..** Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом молекулярной динамики (2ч).

Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом Монте-Карло (2ч)..

**4. Влияния геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений.**

Разработка алгоритма программных компонентов для исследования влияния геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах..

**5. Влияние температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах..** Разработка алгоритма компонентов исследования влияния температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах..

**6. Описание информационных и математических процессов в области физики твердого тела. .**

**7. Анализ результатов..** Сравнения своих результатов с другими авторами. Визуализация результатов. Подготовка короткого сообщения о результатах выполненной работы. Подготовка статьи с описанием компьютерных экспериментов для размещения в сборниках конференциях..

Разработал:  
преподаватель  
кафедры ПМ

А.С. Шевченко

Проверил:  
И.о. декана ТФ

Ю.В. Казанцева