

Рубцовский индустриальный институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

СОГЛАСОВАНО

Декан ТФ

А.В. Сорокин

Рабочая программа дисциплины

Код и наименование дисциплины: **Б1.В.ДВ.2.1 «Компьютерное моделирование физических процессов»**

Код и наименование направления подготовки (специальности): **09.03.01 Информатика и вычислительная техника**

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

Статус дисциплины: **элективные дисциплины (модули)**

Форма обучения: **очная**

Статус	Должность	И.О. Фамилия
Разработал		Е.А. Дудник
Согласовал	Зав. кафедрой «ПМ»	Е.А. Дудник
	руководитель направленности (профиля) программы	Е.А. Дудник

г. Рубцовск

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор	Содержание индикатора
ПК-15	Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	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

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Программирование, Программирование приложений
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Выпускная квалификационная работа, Преддипломная практика

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Общий объем дисциплины в з.е. /час: 7 / 252

Форма обучения	Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
	Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
очная	32	32	32	156	110

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Форма обучения: очная

Семестр: 6

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 3 / 108

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
16	16	16	60	53

Лекционные занятия (16ч.)

- 1. Методология компьютерного моделирования наносистем(2ч.)[3,4,8]** Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.
- 2. Квантовое описание структуры атомного мира(2ч.)[3,4,8]** Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов.
- 3. Моделирование строения атомов(2ч.)[3,4,5,8]** Электронная теория строения атомов. Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности.
- 4. Моделирование молекулярных систем.(2ч.)[1,4,5]** Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии.
- 5. Межмолекулярные взаимодействия(2ч.)[4,6,8]** Межмолекулярные силы. Потенциалы взаимодействия частиц. Молекулярная динамика. Молекулярная механика. Моделирование методами Монте-Карло.
- 6. Механизмы образования наноструктур(2ч.)[3,5]** Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка.
- 7. Многомасштабное моделирование материалов и процессов(2ч.)[3,4,5,8]** Концепция многомасштабного моделирования. Многомасштабное моделирование энергетических процессов. Моделирование в наноструктурной области. Моделирование макроскопических систем.
- 8. Программное обеспечение моделирования наносистем(2ч.)[1,5,9]** Программные компоненты для проведения исследовательских работ при моделировании наносистем. Интегрированные пакеты программ.

Практические занятия (16ч.)

- 1. Индексы Миллера.(4ч.)[1,4,5,9]** Построения атомных плоскостей кристаллической решетки.
- 2. Энергетические характеристики системы(4ч.)[1,3,5,9]** Расчет энергетических характеристик системы атомов.
- 3. Математические методы описания физических процессов.(4ч.)[3,5,8]** Метод молекулярной динамики для двумерных кристаллов
- 4. Описание математической и физической модели.(4ч.)[1,4]** Анализ результатов полученных ранее. Подготовка статьи для размещения в средствах массовой информации.

Лабораторные работы (16ч.)

- 1. Создание атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки(4ч.)[1,2,4,6,7]** Разработка программного модуля создания атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки
- 2. Точечные, линейные дефекты в атомной плоскости гранецентрированной кристаллической решетки(4ч.)[1,2,4,5]** Разработка программного модуля формирования точечных, линейных дефектов в атомной плоскости гранецентрированной кристаллической решетки
- 3. Энергетические характеристики двумерных кристаллов(4ч.)[1,2,4,5]** Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных металлов с использованием потенциала межатомных взаимодействий
- 4. Энергетические характеристики двумерных кристаллов бинарных сплавов(4ч.)[1,2,4,5,7]** Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных бинарных сплавов с использованием потенциала межатомных взаимодействий

Самостоятельная работа (60ч.)

- 1. Подготовка к лабораторным работам(8ч.)[3,4,6,8,9]** Разработка компонентов программного модуля для проведения компьютерных экспериментов
- 2. Изучение литературы(8ч.)[3,5,6,8,9]** Изучение научной литературы, материалов сборников научных трудов и конференций . Обзор литературы по компьютерному моделированию для сравнения результатов , полученных другими авторами.
- 3. Подготовка к экзамену(36ч.)[3,5,6,8,9]**
- 4. Подготовка к практическим занятиям(8ч.)[3,4,5,6]** Изучение исследовательских данных других авторов. Подготовка статьи с описанием физических и математических процессов для размещения в средствах массовой информации.

Семестр: 7

Объем дисциплины в семестре з.е. /час: 4 / 144

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем (час)
Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
16	16	16	96	57

Лекционные занятия (16ч.)

- 1. Методы моделирования в физики конденсированного состояния(2ч.)[1,5]** Статистическая теория упорядоченности. Потенциалы межатомного взаимодействия. Методы моделирования компьютерных экспериментов. Методика проведения компьютерного эксперимента.
- 2. Исследования атомного упорядочения в сплавах со сверхструктурой**

L12(2ч.)[1,6,7] 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. {лекция с разбором конкретных ситуаций} (4ч.)[1,5] Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом молекулярной динамики (2ч). Моделирование процесса атомного механизма структурных превращений методом Монте-Карло (2ч).

4. Влияние геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах(2ч.)[1,4,5,9] Разработка алгоритма программных компонент 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.(2ч.)[4,5,8] Разработка алгоритма компонентов исследования влияния температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах.

6. Физическая и математическая модели процессов в области физики твердого тела(2ч.)[1,3,5] Описание информационных и математических процессов в области физики твердого тела

7. Анализ результатов.(2ч.)[1,4,6] 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.

Практические занятия (16ч.)

1. Планирование компьютерного эксперимента.(4ч.)[1] Описания математической и физической модели для физических процессов в трехмерном кристалле.

2. Анализ работ других авторов, проводивших исследовательские работы в области физики твердого тела методом компьютерного эксперимента.(4ч.) [3,4,6,7] Выявления проблемы, разработка планы компьютерного эксперимента для проведения исследовательских работ. Выбор предмета исследования. Выбор объекта исследования. Выбор метода исследования. Выбор метода представления результатов

3. Сбор данных для описания физической модели.(4ч.)[1,3,4] Подборка данных из аналогичных натуральных экспериментов. Разработка методов сравнения результатов.

4. Работа над оформлением результатов исследовательской работы.(4ч.)[1,3,4] Описание анализа результатов. Оформление статьи для опубликования в средствах

массовой информации

Лабораторные работы (16ч.)

- 1. Формирование трехмерной гранецентрированной кристаллической решетки.(4ч.)[1,5,9]** Разработка программных компонент для создания трехмерной гранецентрированной кристаллической решетки. Предусмотреть ввод структурных дефектов в кристалл.
- 2. Расчет значений потенциала межатомного взаимодействия.(4ч.)[1,5,9]** Разработать программный компонент для расчета значений потенциала межатомного взаимодействия.
- 3. Метод Монте-Карло.(4ч.)[1,5,9]** Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом Монте-Карло.
- 4. Метод молекулярной динамики.(4ч.)[1,5,9]** Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом молекулярной динамики.

Самостоятельная работа (96ч.)

- 1. Подготовка к экзамену(36ч.)[3,4,5,9]**
- 2. Изучение литературных источников(28ч.)[4,7,9]** Изучение учебной и научной литературы. Анализ результатов исследовательских работ других авторов. Подготовка статьи с обзором проблем по научной теме.
- 3. Подготовка к защите лабораторных работ(16ч.)[4,5,9]** Проведение исследовательских работ.
- 4. Подготовка к практическим занятиям(16ч.)[1,3,7]** Изучение исследовательских данных других авторов. Подготовка статьи с описанием физических и математических процессов для размещения в средствах массовой информации.

5. Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Для каждого обучающегося обеспечен индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечным системам: Лань, Университетская библиотека он-лайн, электронной библиотеке АлтГТУ и к электронной информационно-образовательной среде:

1. Дудник, Е.А. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в двумерном кристалле: Монография/ Е.А. Дудник, М.Д. Старостенков. - Баранул: Изд-во АлтГТУ, 2005. - 233 с. (26 экз.)

2. Дудник, Е.А. Компьютерное моделирование физических процессов: методические указания по выполнению лабораторных работ для студентов направления «Информатика и вычислительная техника» /Е.А. Дудник; Рубцовский

индустриальный институт. – Рубцовск: РИИ, 2021. – 36с. URL: [https://edu.rubinst.ru/resources/books/Dudnik_E.A._Komp'yuternoe_modelirovanie_phizicheskikh_protssesov_\(lab.rab.\)_2021.pdf](https://edu.rubinst.ru/resources/books/Dudnik_E.A._Komp'yuternoe_modelirovanie_phizicheskikh_protssesov_(lab.rab.)_2021.pdf) (дата обращения 01.11.2021)

6. Перечень учебной литературы

6.1. Основная литература

3. Старовиков, М. И. Введение в экспериментальную физику : учебное пособие / М. И. Старовиков. — Санкт-Петербург : Лань, 2008. — 240 с. — ISBN 978-5-8114-0862-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/reader/book/379/#233> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

4. Андреев, Л. А. Физика и химия твердого тела. Точечные дефекты в ионных кристаллах : методические указания / Л. А. Андреев, А. В. Новиков, Е. А. Новикова ; под редакцией Б. С. Бокштейн. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2003. — 82 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/56747.html> (дата обращения: 18.11.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

5. Зубкова, Т. М. Технология разработки программного обеспечения : учебное пособие / Т. М. Зубкова. — Оренбург : Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2017. — 469 с. — ISBN 978-5-7410-1785-2. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/78846.html> (дата обращения: 05.02.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

6.2. Дополнительная литература

6. Разумовская, И. В. Физика твердого тела. Часть 2. Динамика кристаллической решетки. Тепловые свойства решетки / И. В. Разумовская. — Москва : Прометей, 2011. — 64 с. — ISBN 978-5-4263-0032-3. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/9611.html> (дата обращения: 18.11.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

7. Ягодкин, Ю. Д. Атомное строение фаз. Кристаллохимия твердых растворов и промежуточных фаз. Структура аморфных, квазикристаллических и нанокристаллических материалов : курс лекций / Ю. Д. Ягодкин, Т. А. Свиридова. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2007. — 107 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/98151.html> (дата обращения: 18.11.2021). — Режим доступа: для авторизир. пользователей

8. Епифанов, Г. И. Физика твердого тела : учебное пособие / Г. И. Епифанов. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 288 с. — ISBN 978-5-8114-1001-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/2023> (дата обращения: 28.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

9. <http://www.mks-phys.ru>

8. Фонд оценочных материалов для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Содержание промежуточной аттестации раскрывается в комплекте контролирующих материалов, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, которые хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном виде и в ЭИОС.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) по дисциплине представлен в приложении А.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Для успешного освоения дисциплины используются ресурсы электронной информационно-образовательной среды, образовательные интернет-порталы, глобальная компьютерная сеть Интернет. В процессе изучения дисциплины происходит интерактивное взаимодействие обучающегося с преподавателем через личный кабинет студента.

№пп	Используемое программное обеспечение
1	Dev-C++
2	LAMMPS Molecular Dynamics Simulator
3	Lazarus
4	LibreOffice
5	Python
6	Windows
7	Антивирус Kaspersky

№пп	Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы
1	Бесплатная электронная библиотека онлайн "Единое окно к образовательным ресурсам" для студентов и преподавателей; каталог ссылок на образовательные интернет-ресурсы (http://Window.edu.ru)
2	Национальная электронная библиотека (НЭБ) — свободный доступ читателей к фондам российских библиотек. Содержит коллекции оцифрованных документов (как открытого доступа, так и ограниченных авторским правом), а также каталог изданий, хранящихся в библиотеках России. (http://нэб.рф/)

10. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы

учебные аудитории для проведения учебных занятий
помещения для самостоятельной работы

Материально-техническое обеспечение и организация образовательного процесса по дисциплине для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с «Положением об обучении инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья».

ПРИЛОЖЕНИЕ А
ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ «Компьютерное моделирование физических процессов»

1. Перечень оценочных средств для компетенций, формируемых в результате освоения дисциплины

Код контролируемой компетенции	Способ оценивания	Оценочное средство
ПК-15: Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	Экзамен	Комплект контролирующих материалов для экзамена

2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания

Оцениваемые компетенции представлены в разделе «Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций» рабочей программы дисциплины «Компьютерное моделирование физических процессов».

При оценивании сформированности компетенций по дисциплине «Компьютерное моделирование физических процессов» используется 100-балльная шкала.

Критерий	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по традиционной шкале
Студент освоил изучаемый материал (основной и дополнительный), системно и грамотно излагает его, осуществляет полное и правильное выполнение заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций, способен ответить на дополнительные вопросы.	75-100	<i>Отлично</i>
Студент освоил изучаемый материал, осуществляет выполнение заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций с незначительными ошибками.	50-74	<i>Хорошо</i>
Студент демонстрирует освоение только основного материала, при выполнении заданий в соответствии с индикаторами достижения компетенций допускает отдельные ошибки, не способен систематизировать материал и делать выводы.	25-49	<i>Удовлетворительно</i>
Студент не освоил основное содержание изучаемого материала, задания в соответствии с индикаторами достижения компетенций не выполнены	<25	<i>Неудовлетворительно</i>

или выполнены неверно.		
------------------------	--	--

3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки уровня достижения компетенций в соответствии с индикаторами

1. Подготовка статей для опубликования в сборниках материалов конференций

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.1 Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

1. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: Опишите физическую модель компьютерного эксперимента для исследования процессов, происходящих на атомном уровне. (ПК-15.1)
2. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: Опишите метод молекулярной динамики для описания процесса межатомного взаимодействия в двумерном кристалле гексагональной решетки. (ПК-15.1)
3. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите метод Монте-Карло для структурных превращений в двумерном кристалле гексагональной решетки бинарного сплава. (ПК-15.1)

2. Разработка программного модуля для исследовательских работ

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.2 Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ

1. Разработайте программную компоненту для визуализации 3D кристалла с гранцентрированной кубической решеткой.
2. Разработайте программную компоненту для построения графика зависимости потенциальной функции межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса в зависимости от расстояний между атомами:

$$\varphi(r) = -\frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^8} + Cr + D.$$

3. Разработайте программную компоненту для расчета энергии для атомной плоскости гранцентрированной решетки Al с индексами Миллера [111].
4. Разработайте программную компоненту для диссипации энергии в кристалле.
5. Разработайте программную компоненту для расчета энергии дефекта в кристалле с точечными дефектами замещения.

3. Подготовка статей для опубликования результатов компьютерного эксперимента

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.1 Подготавливает статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

1. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите методику проведения компьютерного эксперимента для исследования влияния температуры на энергетические характеристики системы: расчет потенциальной энергии, кинетической энергии в 2D кристалле. (ПК-15.1)
2. Для подготовки статьи с описанием информационных и математических процессов для размещения в средствах массовой информации: опишите методику проведения компьютерного эксперимента для исследования влияния концентрации вакансий на энергетические характеристики системы: расчет потенциальной энергии, кинетической энергии в 2D кристалле. (ПК-15.1)

4. Разработка программных модуле в 3D кристалле

Компетенция	Индикатор достижения компетенции
ПК-15 Способен разрабатывать программные компоненты для проведения исследовательских работ	ПК-15.2 Разрабатывает программные компоненты для проведения исследовательских работ

1. Разработайте программную компоненту для визуализации 3D кристалла с гранецентрированной кубической решеткой. (ПК-15.2)
2. Разработайте программную компоненту для расчета сила взаимодействия атомов на границе в 3D кристалле для метода молекулярной динамики. (ПК-15.2)
3. Разработайте программную компоненту для расчета кинетической энергии 3D кристалла Al. (ПК-15.2)

4. Файл и/или БТЗ с полным комплектом оценочных материалов прилагается.