

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. | 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.)[3,8]** Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии.
- 2. Квантовое описание структуры атомного мира(2ч.)[3,8]** Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов.
- 3. Моделирование строения атомов(2ч.)[3,5,8]** Электронная теория строения атомов. Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности.
- 4. Моделирование молекулярных систем.(2ч.)[1,5]** Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии.
- 5. Межмолекулярные взаимодействия(2ч.)[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.)[3,5,8]** 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. Построения атомных плоскостей кристаллической решетки.(4ч.)[1,5,9]**
- 2. Расчет энергетических характеристик системы атомов.(4ч.)[1,3,5,9]**
- 3. Математические методы описания физических процессов. Метод молекулярной динамики для двумерных кристаллов(4ч.)[3,5,8]**
- 4. Описание математической и физической модели. Анализ результатов полученных ранее. Подготовка статьи для размещения в средствах массовой информации.(4ч.)[1]**

Лабораторные работы (16ч.)

- 1. Разработка программного модуля создания атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки(4ч.)[1,2,6]**

2. Разработка программного модуля формирования точечных, линейных дефектов в атомной плоскости гранецентрированной кристаллической решетки(4ч.)[1,2,5]

3. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных металлов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(4ч.)[1,2,5]

4. Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных бинарных сплавов с использованием потенциала межатомных взаимодействий(4ч.)[1,2,5]

Самостоятельная работа (60ч.)

1. Подготовка к лабораторным работам(8ч.)[3,6,8,9] 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. Разработка программных компонентов для исследования влияния геометрического и термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах.(2ч.)[1,5,9]

5. Разработка компонентов исследования влияния температуры и деформации на особенности процесса структурного фазового перехода в упорядочивающихся сплавах.(2ч.)[5,8]

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

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.(2ч.)[1,6]

Практические занятия (16ч.)

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

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

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

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

Лабораторные работы (16ч.)

1. Разработка программных компонент для создания трехмерной гранцентрированной кристаллической решетки. Предусмотреть ввод структурных дефектов в кристалл.(4ч.)[1,5,9]

2. Разработать программный компонент для расчета значений потенциала межатомного взаимодействия.(4ч.)[1,5,9]

3. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом Монте-Карло.(4ч.)[1,5,9]

4. Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом молекулярной

динамики.(4ч.)[1,5,9]

Самостоятельная работа (96ч.)

1. Подготовка к экзамену(36ч.)[3,5,9]

2. Изучение литературных источников(28ч.)[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.)[5,9] Проведение исследовательских работ

4. Подготовка к практическим занятиям(16ч.)[1,3] 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, 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_fizicheskikh_protssosov_\(lab.rab.\)_2021.pdf](https://edu.rubinst.ru/resources/books/Dudnik_E.A._Komp'yuternoe_modelirovanie_fizicheskikh_protssosov_(lab.rab.)_2021.pdf) (дата обращения 01.11.2021)

6. Перечень учебной литературы

6.1. Основная литература

3. Фомин, Д. В. Экспериментальные методы физики твердого тела : учебное пособие : [16+] / Д. В. Фомин. – Изд. 2-е, стер. – Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2019. – 187 с. : ил., схем., табл. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=575229> (дата обращения: 25.02.2022). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-4499-0151-4. – DOI 10.23681/575229. – Текст : электронный.

4. Сарина, М.П. Физика твердого тела : учебное пособие : [16+] / М.П. Сарина ; Новосибирский государственный технический университет. – Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2017. – 107 с. : ил., табл., граф. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=576504> (дата обращения: 25.03.2021). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-7782-3319-5. – Текст : электронный.

5.2. 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. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела : учебное пособие : [16+] / Д.В. Фомин. — Изд. 2-е, стер. — Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2019. — 187 с. : ил., схем., табл. — Режим доступа: по подписке. — URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=575229> (дата обращения: 25.03.2021). — Библиогр. в кн. — ISBN 978-5-4499-0151-4. — DOI 10.23681/575229. — Текст : электронный.

7. Корабельников, Д.В. Физика наноструктур : учебное пособие : [16+] / Д.В. Корабельников, Н.Г. Кравченко, А.С. Поплавной ; Кемеровский государственный университет. — Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2016. — 161 с. : схем., ил. — Режим доступа: по подписке. — URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=481557> (дата обращения: 25.03.2021). — ISBN 978-5-8353-2048-6. — Текст : электронный.

8. Разумовская, И.В. Физика твердого тела : учебное пособие / И.В. Разумовская. — Москва : Прометей, 2011. — Ч. 2. Динамика кристаллической решетки. Тепловые свойства решетки. — 64 с. — Режим доступа: по подписке. — URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=108460> (дата обращения: 25.03.2021). — ISBN 978-5-4263-0032-3. — Текст : электронный.

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 | Lazarus |
| 3 | LibreOffice |
| 4 | Python |
| 5 | Windows |
| 6 | Антивирус Kaspersky |
| 7 | Яндекс.Браузер |
| 8 | 7-Zip |

| №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 не принципиальными 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 | <25 | <i>Неудовлетворительно</i> |

| | | |
|--|--|--|
| достижения компетенций не выполнены или выполнены неверно. | | |
|--|--|--|

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

1. Подготовка статьи с описанием информационных и математических процессов в 2D модели

| 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 программных компонентов в 2D модели

| 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.
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 гранецентрированной 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 статьи с описанием информационных и математических процессов в 3D модели.

| 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 компонентов для проведения исследовательских работ в 3D модели

| 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. (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.