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

СОГЛАСОВАНО

Декан ТФ Ю.В. Казанцева

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: **заочная**

Статус	Должность	И.О. Фамилия
Разработал	преподаватель	М.С. Скоробогатов
Согласовал	Зав. кафедрой «ПМ»	Л.А. Попова
	руководитель направленности (профиля) программы	Л.А. Попова

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	
заочная	16	16	16	204	55

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

Форма обучения: заочная

Семестр: 8

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

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы обучающегося с преподавателем
Лекции	Лабораторные	Практические	Самостоятельная	

	работы	занятия	работа	(час)
8	8	8	120	28

Лекционные занятия (8ч.)

1. Методология компьютерного моделирования наносистем(1ч.)[3,4,8] Общие принципы компьютерного моделирования. Методологические основы вычислительной нанотехнологии

2. Квантовое описание структуры атомного мира(1ч.)[3,4,8] Предпосылки создания квантовой механики. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики. Свойство одноэлектронных атомов.

3. Моделирование строение атомов(1ч.)[3,4,5,8] Электронная теория строения атомов. Метод Харти-Фока. Атомные орбитали. Теория функциональной плотности.

4. Моделирование молекулярных систем.(1ч.)[1,4,5] Физико-химические закономерности строения молекул. Расчет поверхности потенциальной энергии.

5. Межмолекулярные взаимодействия(1ч.)[3,4,8] Межмолекулярные силы. Потенциалы взаимодействия частиц. Молекулярная динамика. Молекулярная механика. Моделирование методами Монте-Карло

6. Механизмы образования наноструктур(1ч.)[3,5] Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка

7. Многомасштабное моделирование материалов и процессов(1ч.)[3,4,5,8] Концепция многомасштабного моделирования. Многомасштабное моделирование энергетических процессов. Моделирование в наноструктурной области. Моделирование макроскопических систем

8. Программное обеспечение моделирования наносистем(1ч.)[1,5,9] Программные компоненты для проведения исследовательских работ при моделирования наносистем. Интегрированные пакеты программ.

Практические занятия (8ч.)

1. Индексы Миллера.(2ч.)[1,4,5,9] Построения атомных плоскостей кристаллической решетки.

2. Энергетические характеристики системы атомов.(2ч.)[1,3,5,9] Расчет энергетических характеристик системы атомов.

3. Математические методы описания физических процессов.(2ч.)[3,5,8] Метод молекулярной динамики для двумерных кристаллов

4. Описание математической и физической модели.(2ч.)[1,4] Анализ результатов полученных ранее. Подготовка статьи для размещения в средствах массовой информации.

Лабораторные работы (8ч.)

1. Создание атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки(2ч.)[1,2,4,7] Разработка программного модуля создания атомных плоскостей гранецентрированной кристаллической решетки

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

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

4. Энергетических характеристик двумерных кристаллов в бинарных сплавах(2ч.)[1,2,4,5,7] Разработка программного модуля расчета энергетических характеристик двумерных кристаллов заданных бинарных сплавов с использованием потенциала межатомных взаимодействий

Самостоятельная работа (120ч.)

1. Подготовка к лабораторным работам(33ч.)[3,4,8,9] Разработка компонентов программного модуля для проведения компьютерных экспериментов

2. Изучение литературы(32ч.)[3,5,8,9] Изучение научной литературы, материалов сборников научных трудов и конференций . Обзор литературы по компьютерному моделированию для сравнения результатов , полученных другими авторами.

3. Подготовка к экзамену(9ч.)[3,5,8,9]

4. Подготовка к практическим занятиям(28ч.)[3,4,5] Изучение исследовательских данных других авторов. Подготовка статьи с описанием физических и математических процессов для размещения в средствах массовой информации

5. Выполнение письменной контрольной работы(18ч.)[1,3,4,5]

Семестр: 9

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	
8	8	8	84	27

Лекционные занятия (8ч.)

1. Методы моделирования в физики конденсированного состояния(1ч.)[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(1ч.)[1,3,7] 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} (2ч.)[1,5] 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(1ч.)[1,4,5,9] 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.(1ч.)[4,5,8] 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(1ч.)[1,3,5]

7. Анализ результатов.(1ч.)[1,3,4] 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 (8ч.)

1. Планирование компьютерного эксперимента.(2ч.)[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.(2ч.) [3,4,7] 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.(2ч.)[1,3,4] Подборка данных из аналогичных натурных экспериментов. Разработка методов сравнения результатов.

4. Работа над оформлением результатов исследовательской работы.(2ч.)[1,3,4] Описание анализа результатов. Оформление статьи для опубликования в средствах массовой информации

Лабораторные работы (8ч.)

1. Создание трехмерной гранецентрированной кристаллической решетки. (2ч.)[1,5,9] Разработка программных компонент для создания трехмерной гранецентрированной кристаллической решетки. Предусмотреть ввод структурных дефектов в кристалл.

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

3. Метод Монте-Карло.(2ч.)[1,5,9] Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом Монте-Карло.

4. Метод молекулярной динамики.(2ч.)[1,5,9] Разработать программные компоненты для проведения моделирования процесса структурного фазового перехода методом молекулярной динамики.

Самостоятельная работа (84ч.)

1. Подготовка к экзамену(9ч.)[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] Разработка программных компонентов для проведения исследовательских работ.

4. Подготовка к практическим занятиям(16ч.)[1,3,7]

5. Выполнения письменной контрольной работы(15ч.)[1,4,5,9] В форме подготовки статьи по заданной тематике

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

Для каждого обучающегося обеспечен индивидуальный неограниченный доступ к электронной информационно-образовательной среде АлтГТУ:

1. Дудник Е.А. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в двумерном кристалле: Монография /Е.А. Дудник, М.Д. Старостенков, 2005.-233с.(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_protsessov_(lab.rab.)_2021.pdf (дата обращения 31.05.2024)

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: 09.06.2024). – 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: 09.06.2024). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-7782-3319-5. – Текст : электронный.

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 // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: https://www.iprbookshop.ru/78846.html (дата обращения: 09.06.2024). — 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: 09.06.2024). – 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: 09.06.2024). – ISBN 978-5-8353-2048-6. – Текст : электронный.

8. Разумовская, И. В. Физика твердого тела : учебное пособие / И. В. Разумовская. – Москва : Прометей, 2011. – Часть 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: 09.06.2024). – 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.

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	LibreOffice
1	Dev-C++
2	Lazarus
2	Windows
3	Антивирус Kaspersky
4	Python
7	Яндекс.Браузер
8	7-Zip

№пп	Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы
1	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».