

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 очная. Семестр 6.

Объем дисциплины в семестре – 3 з.е. (108 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 строения 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 моделировании наносистем. Интегрированные пакеты программ..

Форма обучения очная. Семестр 7.

Объем дисциплины в семестре – 4 з.е. (144 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. Разработка программных компонентов для исследования влияния геометрического и

термического фактора на процесс структурных превращений в упорядочивающихся сплавах.. .

5. Разработка 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:
Декан ТФ

Ю.В. Казанцева