

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**

<b>Статус</b>	<b>Должность</b>	<b>И.О. Фамилия</b>
Разработал	преподаватель	А.С. Шевченко
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	

	<b>работы</b>	<b>занятия</b>	<b>работа</b>	<b>(час)</b>
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 строения 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.)[4,6,8]** 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 моделировании 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.)[1,2,4,6,7]** 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.)[3,4,6,8,9]** Разработка компонентов программного модуля для проведения компьютерных экспериментов

**2. Изучение литературы(32ч.)[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(9ч.)[3,5,6,8,9]**

**4. Подготовка к практическим занятиям(28ч.)[3,4,5,6]** 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.)[1,3,4,5,6]**

#### **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.)[1,6,7]** 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} (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 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.(1ч.)[4,5,8]** Разработка алгоритма компонент 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.)[1,4,6]** 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 (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.) [3,4,6,7]** 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.(2ч.)[1,3,4]** Подборка данных из аналогичных натуральных 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\\_fizicheskikh\\_protssesov\\_\(lab.rab.\)\\_2021.pdf](https://edu.rubinst.ru/resources/books/Dudnik_E.A._Komp'yuternoe_modelirovanie_fizicheskikh_protssesov_(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. 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. 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.

### **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.

<b>№пп</b>	<b>Используемое программное обеспечение</b>
1	LibreOffice
1	Dev-C++
2	Lazarus
2	Windows
3	Антивирус Kaspersky
4	Python
7	Яндекс.Браузер
8	7-Zip

<b>№пп</b>	<b>Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы</b>
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. ( <a href="http://нэб.рф/">http://нэб.рф/</a> )

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

<b>Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>
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».