

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ТЕХНОЛОГИЙ
КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

ОДОБРЕНО
УМС ИЯФИТ Протокол №01/08/24-573.1 от 30.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
ОСНОВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 22.03.01 Материаловедение и технологии
материалов

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
6	1	36	0	0	15		21	0	3
7	1	36	0	0	16		20	0	3
Итого	2	72	0	0	31	0	41	0	

АННОТАЦИЯ

Целями освоения учебной дисциплины являются:

научить студентов принципам построения вычислительного эксперимента с начала постановки физической задачи, выбора методов компьютерного моделирования и построения алгоритма для ее решения;

изучить физические и математические основы методов компьютерного моделирования.

В результате изучения данной дисциплины у студентов должна быть сформирована система знаний по компьютерному моделированию физических процессов в конденсированной среде, необходимых для решения профессиональных задач.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины являются:

научить студентов принципам построения вычислительного эксперимента с начала постановки физической задачи, выбора методов компьютерного моделирования и построения алгоритма для ее решения;

изучить физические и математические основы методов компьютерного моделирования.

В результате изучения данной дисциплины у студентов должна быть сформирована система знаний по компьютерному моделированию физических процессов в конденсированной среде необходимых для решения профессиональных задач.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Учебная дисциплина относится к дисциплинам материаловедческого профиля. Для изучения дисциплины необходимы компетенции, сформированные у обучающихся в результате освоения следующих дисциплин: «Математика: математический анализ, векторный и тензорный анализ, интегральные уравнения», «Математика: аналитическая геометрия, линейная алгебра, теория вероятностей и математическая статистика», «Математика: обыкновенные дифференциальные уравнения, теория функций комплексного переменного», «Физика: механика, молекулярная физика и основы статистической термодинамики, электричество и магнетизм», «Химия элементов и соединений», «Ядерная физика и реакторы», «Физика газов, жидкостей и конденсированного состояния», «Строение вещества и динамика молекул».

Данная дисциплина является базой для изучения ряда специальных дисциплин: «Физическое материаловедение», «Функциональные и конструкционные материалы».

Знание ее содержания необходимо при выполнении работ по курсовому и дипломному проектированию, НИРС, а также при практической работе выпускников по специальности.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

ОПК-1 [1] – Способен решать задачи профессиональной деятельности, применяя методы моделирования, математического анализа, естественнонаучные и общетехнические знания	З-ОПК-1 [1] – знать фундаментальные законы природы и основные физические и математические законы; У-ОПК-1 [1] – уметь применять физические законы и математические методы для решения задач теоретического и прикладного характера; В-ОПК-1 [1] – владеть навыками моделирования, математического анализа, а также решать задачи в области естественнонаучных и общетехнических знаний.
ОПК-8 [1] – Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	З-ОПК-8 [1] – Знать основные принципы работы современных информационных технологий У-ОПК-8 [1] – Уметь использовать основные принципы работы современных информационных технологий В-ОПК-8 [1] – Владеть навыками решения задач в профессиональной деятельности с помощью современных информационных технологий
УКЦ-1 [1] – Способен в цифровой среде использовать различные цифровые средства, позволяющие во взаимодействии с другими людьми достигать поставленных целей	З-УКЦ-1 [1] – Знать: современные информационные технологии и цифровые средства коммуникации, в том числе отечественного производства, а также основные приемы и нормы социального взаимодействия и технологии межличностной и групповой коммуникации с использованием дистанционных технологий У-УКЦ-1 [1] – Уметь: выбирать современные информационные технологии и цифровые средства коммуникации, в том числе отечественного производства, а также устанавливать и поддерживать контакты, обеспечивающие успешную работу в коллективе и применять основные методы и нормы социального взаимодействия для реализации своей роли и взаимодействия внутри команды с использованием дистанционных технологий В-УКЦ-1 [1] – Владеть: навыками применения современных информационных технологий и цифровых средств коммуникации, в том числе отечественного производства, а также методами и приемами социального взаимодействия и работы в команде с использованием дистанционных технологий
УКЦ-2 [1] – Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач	З-УКЦ-2 [1] – Знать: методики сбора и обработки информации с использованием цифровых средств, а также актуальные российские и зарубежные источники информации в сфере профессиональной деятельности, принципы, методы и средства решения стандартных задач профессиональной деятельности с использованием цифровых средств и с учетом основных требований информационной безопасности У-УКЦ-2 [1] – Уметь: применять методики поиска, сбора и обработки информации; с использованием цифровых средств, осуществлять критический анализ и синтез информации, полученной из разных источников, и решать стандартные задачи профессиональной

	<p>деятельности с использованием цифровых средств и с учетом основных требований информационной безопасности</p> <p>В-УКЦ-2 [1] – Владеть: методами поиска, сбора и обработки, критического анализа и синтеза информации с использованием цифровых средств для решения поставленных задач, навыками подготовки обзоров, аннотаций, составления рефератов, научных докладов, публикаций и библиографии по научно-исследовательской работе с использованием цифровых средств и с учетом требований информационной безопасности</p>
<p>УКЦ-3 [1] – Способен ставить себе образовательные цели под возникающие жизненные задачи, подбирать способы решения и средства развития (в том числе с использованием цифровых средств) других необходимых компетенций</p>	<p>З-УКЦ-3 [1] – Знать: основные приемы эффективного управления собственным временем, основные методики самоконтроля, саморазвития и самообразования на протяжении всей жизни с использованием цифровых средств</p> <p>У-УКЦ-3 [1] – Уметь: эффективно планировать и контролировать собственное время, использовать методы саморегуляции, саморазвития и самообучения в течение всей жизни с использованием цифровых средств</p> <p>В-УКЦ-3 [1] – Владеть: методами управления собственным временем, технологиями приобретения. использования и обновления социокультурных и профессиональных знаний, умений, и навыков; методиками саморазвития и самообразования в течение всей жизни с использованием цифровых средств</p>

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
участие в работе группы специалистов при выполнении экспериментов и обработке их результатов по созданию, исследованию и выбору материалов, оценке их технологических и служебных качеств	методы и средства испытаний и диагностики, исследования и контроля качества материалов, пленок и покрытий, полуфабрикатов, заготовок, деталей и изделий, все виды исследовательского, контрольного и	ПК-1 [1] - способен использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их	З-ПК-1[1] - знать основные методы исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке

путем комплексного анализа их структуры и свойств, физико-механических, коррозионных и других испытаний	испытательного оборудования, аналитической аппаратуры, компьютерное программное обеспечение для обработки результатов и анализа полученных данных, моделирования поведения материалов, оценки и прогнозирования их эксплуатационных характеристик	получении, обработке и модификации <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	и модификации; ; У-ПК-1[1] - уметь использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации; ; В-ПК-1[1] - владеть навыками исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации.
---	---	--	--

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование чувства личной ответственности за научно-технологическое развитие России, за результаты исследований и их последствия (В17)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования чувства личной ответственности за достижение лидерства России в ведущих научно-технических секторах и фундаментальных исследованиях, обеспечивающих ее экономическое развитие и внешнюю безопасность, посредством контекстного обучения, обсуждения социальной и практической значимости результатов научных исследований и технологических разработок. 2.Использование воспитательного

		<p>потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования социальной ответственности ученого за результаты исследований и их последствия, развития исследовательских качеств посредством выполнения учебно-исследовательских заданий, ориентированных на изучение и проверку научных фактов, критический анализ публикаций в профессиональной области, вовлечения в реальные междисциплинарные научно-исследовательские проекты.</p>
Профессиональное воспитание	<p>Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (B18)</p>	<p>Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования у студентов ответственности за свое профессиональное развитие посредством выбора студентами индивидуальных образовательных траекторий, организации системы общения между всеми участниками образовательного процесса, в том числе с использованием новых информационных технологий.</p>
Профессиональное воспитание	<p>Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (B19)</p>	<p>1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования способности

		<p>отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед;</p> <p>- формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытий и теорий.</p>
--	--	---

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практи. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>6 Семестр</i>						
1	Первый раздел	1-8	0/0/8		25	КИ-8	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1, 3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3
2	Второй раздел	9-15	0/0/7		25	КИ-15	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1,

							3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3
	<i>Итого за 6 Семестр</i>		0/0/15		50		
	Контрольные мероприятия за 6 Семестр				50	3	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1, 3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3
	<i>7 Семестр</i>						
1	Первый раздел	1-8	0/0/8		25	КИ-8	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1, 3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3

							В-УКЦ-3
2	Второй раздел	9-16	0/0/8		25	КИ-16	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1, 3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3
	<i>Итого за 7 Семестр</i>		0/0/16		50		
	Контрольные мероприятия за 7 Семестр				50	3	3-ОПК-1, У-ОПК-1, В-ОПК-1, 3-ОПК-8, У-ОПК-8, В-ОПК-8, 3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-УКЦ-1, У-УКЦ-1, В-УКЦ-1, 3-УКЦ-2, У-УКЦ-2, В-УКЦ-2, 3-УКЦ-3, У-УКЦ-3, В-УКЦ-3

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
З	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>6 Семестр</i>	0	0	15
1-8	Первый раздел	0	0	8
1 - 2	Введение в методы компьютерного моделирования в конденсированных средах Введение в методы компьютерного моделирования в конденсированных средах. Раз-личные типы вычислительного эксперимента. Методы моделирования микроскопических процессов в конденсированной среде. Моделирование макроскопических процессов в конденсированной среде. Основные методы решения задач моделирования	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
3 - 4	Примеры математических моделей макроскопических процессов на основе законов сохранения (массы, импульса, энергии) Примеры математических моделей макроскопических процессов на основе законов сохранения (массы, импульса, энергии). Модели процессов нелинейной теплопроводности, диффузии, самораспространяющегося высокотемпературного синтеза.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
5 - 6	Примеры моделей на основе закона сохранения энергии Примеры моделей на основе закона сохранения энергии. Свойства моделей теплопередачи Автомодельные решения модели нелинейной теплопроводности.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
7 - 8	Задача о фазовом переходе Задача о фазовом переходе. Задача Стефана. Компьютерное моделирование макроскопических процессов при воздействии на поверхность материала концентрированными потоками энергии.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	Второй раздел	0	0	7
9 - 10	Методы компьютерного моделирования Методы компьютерного моделирования в конденсированных средах на основе микроскопических процессов. Метод молекулярной динамики. Возможности и ограничения метода МД. Моделирование диффузионных процессов методом МД.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
11 - 12	Вычисление термодинамических параметров в методе молекулярной динамики Вычисление термодинамических параметров в методе молекулярной динамики. Компьютерное моделирование фазовых переходов и расчет термодинамических свойств простых жидкостей методом молекулярной динамики.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
13 - 14	Вариационный метод Вариационный метод. Расчетная ячейка и граничные условия. Моделирование атомной структуры в окрестности точечных дефектов.	Всего аудиторных часов		
		0	0	2
		Онлайн		
		0	0	0
15	Исследование вакансий и их комплексов в металлах с ГЦК-структурой с помощью вариационного метода Исследование вакансий и их комплексов в металлах с ГЦК-структурой с помощью вариационного метода.	Всего аудиторных часов		
		0	0	1
		Онлайн		
		0	0	0

	7 Семестр	0	0	16
1-8	Первый раздел	0	0	8
1 - 5	Методы Монте-Карло Статистическая механика в моделировании. Статистическая термодинамика и статисти-ческая кинетика. Виды статистических ансамблей в моделировании Монте-Карло. Основы метода Монте-Карло. Случайные числа. Модель Метрополиса. Модель Изинга. Метод кинетического Монте-Карло. Метод объектного Монте-Карло.	Всего аудиторных часов		
		0	0	5
		Онлайн		
		0	0	0
6 - 8	Методы мезоскопического уровня Определение методов мезоскопического уровня. Группы методов, описывающие системы и протекающие в них процессы на мезоуровне. Области применения методов мезоуровня. Дислокационная динамика. Модели кинетического фазового поля. Метод клеточных автоматов. Модель Поттса.	Всего аудиторных часов		
		0	0	3
		Онлайн		
		0	0	0
9-16	Второй раздел	0	0	8
9 - 13	Методы макроскопического уровня Примеры моделей на основе закона сохранения энергии. Модели теплопередачи. Модели нелинейной теплопроводности. Задача о фазовом переходе.	Всего аудиторных часов		
		0	0	5
		Онлайн		
		0	0	0
14 - 16	Типы подходов многоуровневого моделирования. Концепция многоуровневого подхода. Типы подходов многоуровневого моделирования. Примеры решения задач материаловедения с использованием многоуровневого подхода моделирования	Всего аудиторных часов		
		0	0	3
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Недели	Темы занятий / Содержание
	6 Семестр
1 - 2	Лабораторная работа № 1 Введение в методы компьютерного моделирования в конденсированных средах
3 - 4	Лабораторная работа № 2 Примеры математических моделей макроскопических процессов на основе законов сохранения (массы, импульса, энергии)
5 - 6	Лабораторная работа № 3

	Примеры моделей на основе закона сохранения энергии
7 - 8	Лабораторная работа № 4 Задача о фазовом переходе
9 - 10	Лабораторная работа № 5 Методы компьютерного моделирования
11 - 12	Лабораторная работа № 6 Вычисление термодинамических параметров в методе молекулярной динамики
13 - 14	Лабораторная работа № 7 Вариационный метод
15	Лабораторная работа № 8 Исследование вакансий и их комплексов в металлах с ГЦК-структурой с помощью вариационного метода.
	<i>7 Семестр</i>
1 - 5	Лабораторная работа № 1 Методы Монте-Карло
6 - 8	Лабораторная работа № 2 Методы мезоскопического уровня (часть 1)
9 - 13	Лабораторная работа № 3 Методы макроскопического уровня (часть 2)
14 - 16	Лабораторная работа № 4 Типы подходов многоуровневого моделирования.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы учебной дисциплины используются различные образовательные технологии – занятия проводятся в форме лабораторных работ. Лабораторные работы охватывают практически все разделы учебного курса.

Для контроля усвоения студентом разделов данного курса используются тестовые технологии, ответы на которые позволяют судить об усвоении студентом данного курса. Самостоятельная работа студентов подразумевает под собой проработку материала с использованием рекомендуемой литературы.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)	Аттестационное мероприятие (КП 2)
ОПК-1	З-ОПК-1	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
	У-ОПК-1	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
	В-ОПК-1	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
ОПК-8	З-ОПК-8	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
	У-ОПК-8	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
	В-ОПК-8	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16
ПК-1	З-ПК-1	З, КИ-8, КИ-15	З, КИ-8, КИ-16

УКЦ-1	У-ПК-1	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	В-ПК-1	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	З-УКЦ-1	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
УКЦ-2	У-УКЦ-1	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	В-УКЦ-1	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	З-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
УКЦ-3	У-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	В-УКЦ-2	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	З-УКЦ-3	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
УКЦ-3	У-УКЦ-3	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	В-УКЦ-3	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16
	З-УКЦ-3	3, КИ-8, КИ-15	3, КИ-8, КИ-16

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – «хорошо»	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – «удовлетворительно»	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 620 Ф50 Физическое материаловедение Т.1 Физика твердого тела, , Москва: НИЯУ МИФИ, 2012

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 519 С17 Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры : , Михайлов А.П., Самарский А.А., М.: Физматлит, 2002

2. 53 X35 Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике : , Хеерман Д.В., Москва: Наука, 1990

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При изучении классификации методов компьютерного моделирования необходимо обратить внимание на:

количество и характерные особенности уровней компьютерного моделирования,
характерные размерные и временные масштабы объектов и явлений, изучаемых физическим материаловедением.

При изучении атомистических и микроскопических методов моделирования обратить внимание на:

понятие расчетной ячейки,
типы граничных условий и их применение,
способы описания потенциальной энергии межатомного взаимодействия и область их применимости,
особенности и пределы применимости метода Хартри-Фока,

особенности и пределы применимости метода Квантового Монте-Карло,
особенности и пределы применимости теории функционала плотности,
способы решения уравнения Шредингера,
понятие приближения Борна-Оппенгеймера,
понятие волновой функции,
понятие псевдопотенциала,
определение потенциальной поверхности и теорема Хеллмана-Фейнмана,
классификацию методов минимизации энергии,
область применимости каждого из классов методов минимизации энергии,
метод минимизации наискорейшего спуска,
метод минимизации сопряженных градиентов,
метод минимизации Ньютона-Рафсона,
определение метода молекулярной динамики,
определение эргодической системы,
метод конечных разностей,
виды статистических ансамблей,
понятие статсумма,
алгоритм Эйлера,
алгоритм Верле,
алгоритм предиктор-корректор,
понятие термостата,
понятие баростата,
понятие статистической термодинамики,
понятие статистической кинетики,
понятие фазовое пространство,
определение фазового пространства Гиббса,
определение фазового пространства Гельмгольца,
определение простой и существенной выборки,
метод Монте-Карло,
модель Метрополиса,
модель Изинга,
определение вероятности событий.

При изучении методов мезо- и макро-уровней обратить внимание на:

типы и области применения методов,
метод дискретной дислокационной динамики,
модели кинетического фазового поля,
метод клеточных автоматов,
модель Поттса,
модели на основе закона сохранения энергии,
решение задачи теплопроводности.

При изучении многоуровневого подхода компьютерного моделирования обратить внимание на:

понятие многоуровневого подхода,
построение последовательных моделей,

построение параллельных моделей.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Для проведения занятий необходимо руководствоваться материалами, изложенными в учебнике: Физическое материаловедение: Учебник для вузов: В 7 т. /Под общей ред. Б.А. Калина. Том 1. Физика твердого тела – М.: НИЯУ МИФИ, 2012 и другими, приведенными в списке дополнительной литературы.

Автор(ы):

Бородин Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н., с.н.с.