

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования



**Пермский национальный исследовательский
политехнический университет**

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе


_____ Н.В.Лобов

« 09 » декабря 20 19 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина: _____ Математическое моделирование в материаловедении
(наименование)

Форма обучения: _____ очная
(очная/очно-заочная/заочная)

Уровень высшего образования: _____ магистратура
(бакалавриат/специалитет/магистратура)

Общая трудоёмкость: _____ 108 (3)
(часы (ЗЕ))

Направление подготовки: 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

(код и наименование направления)

Направленность: _____ Материаловедение и технологии функциональных
металлических, керамических, композиционных материалов

(наименование образовательной программы)

1. Общие положения

1.1. Цели и задачи дисциплины

Получение магистрантами знаний в области математического моделирования в материаловедении.

В процессе освоения данной дисциплины студент углубляет и демонстрирует следующие общекультурные и профессиональные компетенции подготовки:

- способностью самостоятельно развивать базовые знания теоретических и прикладных наук при моделировании, теоретическом и экспериментальном исследовании материалов и процессов в профессиональной деятельности (ОПК-5);
- способностью использовать методы моделирования и оптимизации, стандартизации и сертификации для оценки и прогнозирования свойств материалов и эффективности технологических процессов (ПК-4).

1.2. Изучаемые объекты дисциплины

- современное состояние исследований в области математического моделирования в материаловедении;
- дифференциальные уравнения в частных производных для процессов диффузии, теплопереноса, основные уравнения теории фазовых переходов;
- современные математические инструменты моделирования материальных процессов.

1.3. Входные требования

Не предусмотрены

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
ОПК-4	ИД-1ОПК-4	Основные составляющие математической модели объекта и их характеристики: уравнения, описывающие моделируемую систему, методы решения, программные комплексы, реализующие модель.	Знает основные правила поиска и отбора информации, методы использования информации для подготовки и принятия решений в научных исследованиях и в практической технической деятельности.	Контрольная работа

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
ОПК-4	ИД-2ОПК-4	Находить адекватные уравнения состояний материалов и численные значения материальных параметров для моделей.	Умеет самостоятельно разрабатывать, использовать, систематизировать и анализировать методическую, научно-техническую и технологическую литературу, для принятия решений в научных исследованиях и в профессиональной деятельности	Индивидуальное задание
ОПК-4	ИД-3ОПК-4	Разрабатывать алгоритмы компьютерной реализации моделей .	Владеет приемами умственной деятельности, связанными с анализом, синтезом, сравнением, классификацией, структурированием и систематизацией информации.	Индивидуальное задание
ОПК-5	ИД-1ОПК-5	Основные численные методы решения уравнений вычислительного материаловедения.	Знает предмет исследования, методы отбора и обработки информации, связанные с численными расчетами, обобщением, систематизацией и классификацией данных.	Контрольная работа
ОПК-5	ИД-2ОПК-5	Эффективность и реализуемость численных методов на доступных для реализации моделей вычислительных мощностях.	Умеет оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований по совокупности признаков, обосновывать выбор оптимального решения, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях	Индивидуальное задание
ОПК-5	ИД-3ОПК-5	Практическое применение разработанных математических моделей для достижения требуемого комплекса свойств новых материалов.	Владеет навыками проектирования инновационных технологических процессов получения и обработки современных материалов для достижения требуемого комплекса свойств с учетом экологических, экономических, и других	Индивидуальное задание

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
			факторов.	
ПКО-2	ИД-1ПКО-2	Основные понятия математического моделирования и виды математических моделей.	Знает перечень основных информационно-коммуникационных технологий и информационных ресурсов в области материаловедения и технологии материалов	Контрольная работа
ПКО-2	ИД-2ПКО-2	Выбирать адекватный тип модели для прогнозирования свойств материала; Определять типы химических связей в материалах ;	Умеет находить и выбирать требуемые ресурсы и источники информации для решения поставленных научно-исследовательских и расчетно-аналитических задач в области материаловедения и технологии материалов	Контрольная работа
ПКО-2	ИД-3ПКО-2	Навыками постановки задач математического моделирования для конкретных материалов; Навыками применения специальных математических инструментов к решению задач материаловедения;	Владет навыками анализа, систематизации, обработки и обобщения полученной информации из разных информационных ресурсов	Зачет

3. Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		1	2
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	26	26	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)	6	6	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	18	18	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	82	82	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен			
Дифференцированный зачет			
Зачет	9	9	
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	108	108	

4. Содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
2-й семестр				
«Основные понятия математического моделирования»	1	0	2	8
Моделирование и моделирование. Детерминированные и стохастические модели. Основные типы моделей, применяемые в материаловедении: (компьютерные, атомистические, континуальные, Монте-Карло и другие). Примеры известных моделей. Метод Монте-Карло и его применение к вычислению интегралов и решению уравнений.				
Элементы метода молекулярной динамики	1	0	2	12
Молекулярные уравнения упругих свойств твердых тел. Вычисление упругой энергии кристаллов в приближении ближайших соседей. Вычисление объемного модуля упругости Ван-дер-Ваальсских кристаллов с потенциалом Леннарда-Джонса. Сведение макроскопических модулей упругости к атомным свойствам - общий случай. Учет кинетической энергии атомов.				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Фононная модель Дебая твердого тела.	1	0	4	14
Основные уравнение. Квантование упругих колебаний в твердых телах. Температура Дебая. Уравнение Кристоффеля для упругих волн. Решение уравнения Кристоффеля. Упругая и тепловая энергия твердого тела в модели Дебая.				
Фазовые превращения в материалах.	1	0	4	16
Фазовые превращения в материалах. Понятие фазового перехода и его термодинамические признаки. Элементы термодинамики. Термодинамические потенциалы. Равновесие фаз. Уравнение Клаузиуса-Клапейрона. Вычисление энтальпии фазового перехода в модели Дебая.				
Фракталы, самоподобие и размерность.	1	0	2	16
Математические и природные фракталы. Самоподобие и размерность. Броуновское движение, показатель Херста, показатель шероховатости поверхности. Основные экспериментальные факты и трудности фрактального описания. Связь вязкости разрушения с фрактальными характеристиками. Физические источники фрактальности поверхностей разрушения.				
Моделирование свойств полимерных связующих.	1	0	4	16
Структура и свойства полимеров. Температурно-временная аналогия. Оценка параметров температурно-временной аналогии. Прогнозирование деформационных свойств полимеров на основе температурно-временной аналогии.				
ИТОГО по 2-му семестру	6	0	18	82
ИТОГО по дисциплине	6	0	18	82

Тематика примерных практических занятий

№ п.п.	Наименование темы практического (семинарского) занятия
1	Реализация модели перколяции по узлам на решетке.
2	Построение зависимости размеров кластеров от вероятности перколяции.
3	Определение порога перколяции на квадратной решетке.
4	Вычисление пределов прочности в модели пучка.
5	Прогнозирование перехода к квазипластическому разрушению в модели пучка.
6	Вычисление показателей шероховатости поверхностей.

№ п.п.	Наименование темы практического (семинарского) занятия
7	Вычисление вязкости разрушения по фрактальным характеристикам.

5. Организационно-педагогические условия

5.1. Образовательные технологии, используемые для формирования компетенций

Проведение лекционных занятий по дисциплине основывается на активном методе обучения, при которой учащиеся не пассивные слушатели, а активные участники занятия, отвечающие на вопросы преподавателя. Вопросы преподавателя нацелены на активизацию процессов усвоения материала, а также на развитие логического мышления. Преподаватель заранее намечает список вопросов, стимулирующих ассоциативное мышление и установления связей с ранее освоенным материалом.

Практические занятия проводятся на основе реализации метода обучения действием: определяются проблемные области, формируются группы. При проведении практических занятий преследуются следующие цели: применение знаний отдельных дисциплин и креативных методов для решения проблем и принятия решений; отработка у обучающихся навыков командной работы, межличностных коммуникаций и развитие лидерских качеств; закрепление основ теоретических знаний.

При проведении учебных занятий используются интерактивные лекции, групповые дискуссии, ролевые игры, тренинги и анализ ситуаций и имитационных моделей.

5.2. Методические указания для обучающихся по изучению дисциплины

При изучении дисциплины обучающимся целесообразно выполнять следующие рекомендации:

1. Изучение учебной дисциплины должно вестись систематически.
2. После изучения какого-либо раздела по учебнику или конспектным материалам рекомендуется по памяти воспроизвести основные термины, определения, понятия раздела.
3. Особое внимание следует уделить выполнению отчетов по практическим занятиям и индивидуальным комплексным заданиям на самостоятельную работу.
4. Вся тематика вопросов, изучаемых самостоятельно, задается на лекциях преподавателем. Им же даются источники (в первую очередь вновь изданные в периодической научной литературе) для более детального понимания вопросов, озвученных на лекции.

6. Перечень учебно-методического и информационного обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

6.1. Печатная учебно-методическая литература

№ п/п	Библиографическое описание (автор, заглавие, вид издания, место, издательство, год издания, количество страниц)	Количество экземпляров в библиотеке
1. Основная литература		
1	Киттель Ч. Введение в физику твердого тела : пер. с англ. / Ч. Киттель. - Москва: Наука, 1978.	5
2. Дополнительная литература		
2.1. Учебные и научные издания		
1	Костиков В.И. Сверхвысокотемпературные композиционные материалы / В.И.Костиков, А.Н.Варенков. - М.: Интермет Инжиниринг, 2003.	16

2	Технология и проектирование углерод-углеродных композитов и конструкций / Ю.В. Соколкин [и др.]. - М.: Наука, Физматлит, 1996.	22
3	Харрис П Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века : Пер. с англ / ПХаррис. - М.: Техносфера, 2003.	2
2.2. Периодические издания		
1	Аэрокосмическая техника : [сборник статей] / Пермский государственный технический университет, Аэрокосмический факультет. - Пермь: Изд-во ПГТУ, 1997-	
2	Механика композиционных материалов и конструкций : всероссийский научный журнал / Российская академия наук. Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов управления; Институт прикладной механики; Общественная академия знаний. - Москва: Ин-т прикл. механики РАН, 1995 - .	
2.3. Нормативно-технические издания		
	Не используется	
3. Методические указания для студентов по освоению дисциплины		
	Не используется	
4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента		
	Не используется	

6.2. Электронная учебно-методическая литература

Вид литературы	Наименование разработки	Ссылка на информационный ресурс	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
Основная литература	Ghosh S., Dimiduk D.(Eds.) . Computational Methods for Microstructure-Property Relationships.– Springer, 2011.– 658 p.	http://eds.b.ebscohost.com/eds/detail/detail?sid=212b71ee-91ce-40d6-bca7-beb81263abec%40sessionmgr107&vid=0&hid=119&bdata=Jmxhbmc9cnUmc2l0ZT1lZHMtbGl2ZQ%3d%3d#AN=371186&db=edsebk	сеть Интернет; авторизованный доступ
Основная литература	S.Biswas, P.Ray, B.K.Chakrabarti. Statistical Physics of Fracture, Breakdown, and Earthquakes.– Wiley-VCH, 2015.– 326 p.	http://eds.b.ebscohost.com/eds/detail/detail?vid=8&sid=4c738344-e3d1-4ea3-9019-d99b39287e3f%40sessionmgr120&hid=119&bdata=Jmxhbmc9cnUmc2l0ZT1lZHMtbGl2ZQ%3d%3d#AN=991305&db=edsebk	сеть Интернет; авторизованный доступ

6.3. Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, используемое при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Вид ПО	Наименование ПО
Операционные системы	MS Windows XP (подп. Azure Dev Tools for Teaching до 27.02.2022)
Офисные приложения.	Microsoft Office Professional 2007. лиц. 42661567
Прикладное программное обеспечение общего назначения	Dr.Web Enterprise Security Suite, 3000 лиц, ПНИПУ ОЦНИТ 2017
Прикладное программное обеспечение общего назначения	MATHCAD 14 Academic, ПНИПУ 2009 г.
Среды разработки, тестирования и отладки	Java (JDK + JRE) Sun License (GPL) свободное ПО

6.4. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Наименование	Ссылка на информационный ресурс
База данных Scopus	https://www.scopus.com/
База данных Springer Nature e-books	http://link.springer.com/ http://jwww.springerprotocols.com/ http://materials.springer.com/ http://zbmath.org/ http://npg.com/
База данных Web of Science	http://www.webofscience.com/
База данных Wiley Journals	http://onlinelibrary.wiley.com/
База данных научной электронной библиотеки (eLIBRARY.RU)	https://elibrary.ru/
Научная библиотека Пермского национального исследовательского политехнического университета	http://lib.pstu.ru/
Электронно-библиотечная система Лань	https://e.lanbook.com/
Электронно-библиотечная система IPRbooks	http://www.iprbookshop.ru/
Информационные ресурсы Сети КонсультантПлюс	http://www.consultant.ru/

7. Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине

Вид занятий	Наименование необходимого основного оборудования и технических средств обучения	Количество единиц
Лекция	Ноутбук	1
Лекция	Проектор	1
Практическое занятие	Компьютер	12

8. Фонд оценочных средств дисциплины

Описан в отдельном документе