

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



**Пермский национальный исследовательский
политехнический университет**

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной
деятельности

 А.Б. Петроченков

« 03 » марта 20 23 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: Экспериментальная механика
(наименование образовательной программы)

1. Общие положения

1.1. Цели и задачи дисциплины

Получение магистрантами знаний в области математического моделирования в материаловедении.
Задачи:

- изучение основных понятий и определений в области математического моделирования в материаловедении, основных моделей механики трещин, фазовых переходов и стохастических процессов в материалах;
- формирование умения выбора адекватных моделей поведения материалов и процессов;
- формирование навыков практического применения моделей, использования специальных математических инструментов современных моделей материалов.

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	Знать 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.	Коллоквиум

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	Уметь 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	Контрольная работа
ОПК-4	ИД-3ОПК-4	Владеть навыками разработки алгоритмов компьютерной реализации моделей	Владеет приемами умственной деятельности, связанными с анализом, синтезом, сравнением, классификацией, структурированием и систематизацией информации.	Индивидуальное задание
ОПК-5	ИД-1ОПК-5	Знать основные численные методы решения уравнений вычислительного материаловедения	Знает предмет исследования, методы отбора и обработки информации, связанные с численными расчетами, обобщением, систематизацией и классификацией данных.	Коллоквиум
ОПК-5	ИД-2ОПК-5	Уметь оценивать 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	Владеть навыками практического применения 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	Знать основные понятия математического моделирования и виды математических моделей	Знает перечень основных информационно-коммуникационных технологий и информационных ресурсов в области материаловедения и технологии материалов	Коллоквиум
ПКО-2	ИД-2ПКО-2	Уметь выбирать адекватный тип модели для прогнозирования свойств материала и 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	Владеть навыками постановки задач математического моделирования для конкретных материалов и навыками применения специальных математических инструментов к решению задач материаловедения	Владеет 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 котором 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 установление 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	Технология и проектирование углерод-углеродных композитов и конструкций / Ю.В. Соколкин [и др.]. - М.: Наука, Физматлит, 1996.	22
2. Дополнительная литература		
2.1. Учебные и научные издания		
1	Киттель Ч. Введение в физику твердого тела : пер. с англ. / Ч. Киттель. - Москва: Наука, 1978.	5

2	Костиков В.И. Сверхвысокотемпературные композиционные материалы / В.И.Костиков,А.Н.Варенков. - М.: Интернет Инжиниринг, 2003.	16
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)
Дополнительная литература	Computational Materials Science: An Introduction, Second Edition	https://www.crcpress.com/Computational-Materials-Science-An-Introduction-Second-Edition/Lee/p/book/9781498749732	локальная сеть; авторизованный доступ
Дополнительная литература	Костиков В.И. Сверхвысокотемпературные композиционные материалы / В.И.Костиков,А.Н.Варенков. - М.: Интернет Инжиниринг, 2003.	http://elib.pstu.ru/Record/RUPSTUbooks62091	локальная сеть; авторизованный доступ
Дополнительная литература	Технология и проектирование углерод-углеродных композитов и конструкций / Ю.В. Соколкин [и др.]. - М.: Наука, Физматлит, 1996.	http://elib.pstu.ru/Record/RUPSTUbooks22194	локальная сеть; авторизованный доступ

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	локальная сеть; авторизованный 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	локальная сеть; авторизованный доступ
Основная литература	Киттель Ч. Введение в физику твердого тела : пер. с англ. / Ч. Киттель. - Москва: Наука, 1978.	http://elib.pstu.ru/Record/RUPSTUbooks107370	локальная сеть; 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 27.03.2022)
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 Web of Science	http://www.webofscience.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/
Электронно-библиотечная система ЮРАЙТ	https://biblio-online.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

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«Пермский национальный исследовательский политехнический
университет»**

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

(фонд оценочных средств)

для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

«Математическое моделирование в материаловедении»

Приложение к рабочей программе дисциплины

Направление подготовки:	22.04.01 Материаловедение и технологии материалов
Направленность (профиль) образовательной программы:	Экспериментальная механика
Квалификация выпускника:	«Магистр»
Выпускающая кафедра:	Экспериментальная механика и конструкционное материаловедение
Форма обучения:	Очная
Форма промежуточной аттестации:	Зачет

Пермь 2023

Оценочные материалы (фонд оценочных средств) для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине является частью (приложением) к рабочей программе дисциплины. Для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине устанавливает формы и процедуры текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.

1. Перечень контролируемых результатов обучения по дисциплине, объекты оценивания и виды контроля

Согласно РПД освоение учебного материала дисциплины запланировано в течение одного семестра (2-го семестра учебного плана) и разбито на 6 учебных модулей. В каждом модуле предусмотрены аудиторские лекционные и практические занятия, а также самостоятельная работа студентов. В рамках освоения учебного материала дисциплины формируются компоненты компетенций *знать, уметь, владеть*, указанные в РПД, которые выступают в качестве контролируемых результатов обучения по дисциплине (табл. 1.1).

Контроль уровня усвоенных знаний, усвоенных умений и приобретенных владений осуществляется в рамках текущего, рубежного и промежуточного контроля при изучении теоретического материала и экзамена. Виды контроля сведены в таблицу 1.1.

Таблица 1.1. Перечень контролируемых результатов обучения по дисциплине

Контролируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУВы)	Вид контроля		
	Текущий	Промежуточный / рубежный	Итоговый
	ТО	Т/КР/ КИЗ	Зачет
Усвоенные знания			
3.1 знать основные составляющие математической модели объекта и их характеристики: уравнения, описывающие моделируемую систему, методы решения, программные комплексы, реализующие модель	ТО		ИЗ
3.2 знать основные численные методы решения уравнений вычислительного материаловедения	ТО		ИЗ
3.3. знать основные понятия математического моделирования и виды математических моделей	ТО		ИЗ
Освоенные умения			
У.1 уметь находить адекватные уравнения состояний материалов и численные значения материальных параметров для моделей		КР 1,2	ИЗ
У.2 уметь оценивать эффективность и реализуемость численных методов на доступных для реализации моделей вычислительных мощностях		КР 1,2	ИЗ
У.3. уметь выбирать адекватный тип модели для прогнозирования свойств материала и определять типы химических связей в материалах		КР 1,2	ИЗ
Приобретенные владения			
В.1 владеть навыками разработки алгоритмов компьютерной реализации моделей		КР 1,2	ИЗ
В.2 владеть навыками практического применения разработанных математических моделей для достижения требуемого комплекса свойств новых материалов		КР 1,2	ИЗ
В.3 владеть навыками постановки задач		КР 1,2	ИЗ

математического моделирования для конкретных материалов и навыками применения специальных математических инструментов к решению задач материаловедения			
--	--	--	--

ТО – коллоквиум (теоретический опрос); Т/КР – рубежное тестирование (контрольная работа); ТВ – теоретический вопрос; ПЗ – практическое задание; ИЗ – индивидуальное задание.

Итоговой оценкой достижения результатов обучения по дисциплине является промежуточная аттестация в виде зачета, проводимая по результатам текущего, промежуточного и рубежного контроля.

1. Виды контроля, типовые контрольные задания и шкалы оценивания результатов обучения

Текущий контроль успеваемости имеет целью обеспечение максимальной эффективности учебного процесса, управление процессом формирования заданных компетенций обучаемых, повышение мотивации к учебе и предусматривает оценивание хода освоения дисциплины. В соответствии с Положением о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, специалитета и магистратуры в ПНИПУ предусмотрены следующие виды и периодичность текущего контроля успеваемости обучающихся:

- входной контроль, проверка исходного уровня подготовленности обучаемого и его соответствия предъявляемым требованиям для изучения данной дисциплины;
- текущий контроль усвоения материала (уровня освоения компонента «знать» заданных компетенций) на каждом групповом занятии и контроль посещаемости лекционных занятий;
- промежуточный и рубежный контроль освоения обучаемыми отдельных компонентов «знать», «уметь» заданных компетенций путем компьютерного или бланочного тестирования, контрольных опросов, контрольных работ (индивидуальных домашних заданий), защиты отчетов по лабораторным работам, и т.д.

Рубежный контроль по дисциплине проводится на следующей неделе после прохождения модуля дисциплины, а промежуточный – во время каждого контрольного мероприятия внутри модулей дисциплины;

- межсессионная аттестация, единовременное подведение итогов текущей успеваемости не менее одного раза в семестр по всем дисциплинам для каждого направления подготовки (специальности), курса, группы;
- контроль остаточных знаний.

2.1. Текущий контроль усвоения материала

Текущий контроль усвоения материала в форме выборочного теоретического опроса студентов проводится по каждой теме. Результаты по 5-балльной шкале оценивания заносятся в книжку преподавателя и учитываются в виде интегральной оценки при проведении промежуточной аттестации.

2.2. Промежуточный и рубежный контроль

Промежуточный и рубежный контроль для комплексного оценивания

усвоенных знаний, освоенных умений и приобретенных владений (табл. 1.1) проводится в форме защиты практических работ и рубежных самостоятельных (контрольных) работ.

2.2.1. Защита практических работ

Всего запланировано 7 практических работ. Типовые темы практических работ приведены в РПД.

Защита практической работы проводится индивидуально каждым студентом или группой студентов. Типовые шкала и критерии оценки приведены в общей части ФОС образовательной программы.

2.2.2. Рубежная контрольная работа

Согласно РПД запланировано 2 рубежные контрольные работы (КР) после освоения студентами учебных модулей дисциплины. Первая КР по модулю 2 «Элементы метода молекулярной динамики», вторая КР – по модулю 4 «Фазовые превращения в материалах».

Типовые задания первой КР:

1. Вычислить решеточные суммы для ОЦК материала с точностью до ближайших, вторых и третьих соседей в решетке и сравнить с точными справочными решениями.

2. Вычислить модуль объемного сжатия ОЦК материала с потенциалом межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса.

Типовые задания второй КР:

1. Составить алгоритм и компьютерный код вычисления средних по Дебаю скоростей звука в анизотропном материале.

2. Вычислить температуру Дебая для заданного материала.

3. Вычислить энтальпию фазового превращения в жаропрочном сплаве.

Типовые шкала и критерии оценки результатов рубежной контрольной работы приведены в общей части ФОС образовательной программы.

2.2.3. Выполнение индивидуального задания на самостоятельную работу

Для оценивания навыков и опыта деятельности (владения), как результата обучения по дисциплине, не имеющей курсового проекта или работы, используется индивидуальное задание студенту.

Типовые шкала и критерии оценки результатов защиты индивидуального комплексного задания приведены в общей части ФОС образовательной программы.

2.3. Промежуточная аттестация (итоговый контроль)

2.3.1. Процедура промежуточной аттестации без дополнительного аттестационного испытания

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета. Зачет по дисциплине основывается на результатах текущего, промежуточного и рубежного контроля по данной дисциплине.

Критерии выведения итоговой оценки за компоненты компетенций при проведении промежуточной аттестации в виде зачета приведены в общей части ФОС образовательной программы.

2.3.2. Процедура промежуточной аттестации с проведением аттестационного испытания

В отдельных случаях (например, в случае переаттестации дисциплины) промежуточная аттестация в виде зачета по дисциплине может проводиться с проведением аттестационного испытания по билетам. Билет содержит теоретические вопросы (ТВ) для проверки усвоенных знаний, практические задания (ПЗ) для проверки освоенных умений и комплексные задания (КЗ) для контроля уровня приобретенных владений всех заявленных компетенций.

Билет формируется таким образом, чтобы в него попали вопросы и практические задания, контролирующие уровень сформированности *всех* заявленных компетенций.

2.3.2.1. Типовые вопросы и задания для зачета по дисциплине

Типовые вопросы для контроля усвоенных знаний:

1. Составные части метода математического моделирования
2. Суть метода молекулярной динамики для прогнозирования свойств материалов. Типы межатомных потенциалов.
3. Молекулярные уравнения упругих свойств твердых тел.
4. Вычисление упругой энергии кристаллов в приближении ближайших соседей.
5. Уравнение Кристоффеля для упругих волн в анизотропном теле.
6. Основные уравнения модели Дебая твердого тела.

Типовые вопросы и практические задания для контроля освоенных умений:

1. Вычислить решеточную сумму для конкретного материала в различных приближениях.
2. Вычислить модуль объемного сжатия по методу молекулярной динамики.
3. Составить и решить уравнение Кристоффеля для заданного направления в анизотропном теле.
4. Разработать алгоритм (компьютерный код) вычисления температуры Дебая анизотропного кристалла.

Типовые комплексные задания для контроля приобретенных владений:

1. Составить план вычисления упругих модулей методом молекулярной динамики. Произвести поиск адекватных потенциалов взаимодействия атомов или молекул, числовых значений параметров потенциалов, кристаллографических параметров материала.
2. Составить план математического моделирования фазового превращения в материале. Выявить термодинамические переменные, описывающие фазовый переход. Написать основные уравнения для этих переменных. Выбрать метод решения уравнений и разработать блок-схему алгоритма решения

2.3.2.2. Шкалы оценивания результатов обучения на зачете

Оценка результатов обучения по дисциплине в форме уровня сформированности компонентов *знать, уметь, владеть* заявленных компетенций проводится по 4-х балльной шкале оценивания.

Типовые шкала и критерии оценки результатов обучения при сдаче зачета

для компонентов *знать, уметь и владеть* приведены в общей части ФОС образовательной программы.

3. Критерии оценивания уровня сформированности компонентов и компетенций

3.1. Оценка уровня сформированности компонентов компетенций

При оценке уровня сформированности компетенций в рамках выборочного контроля при зачете считается, что *полученная оценка за компонент проверяемой в билете компетенции обобщается на соответствующий компонент всех компетенций, формируемых в рамках данной учебной дисциплины.*

Общая оценка уровня сформированности всех компетенций проводится путем агрегирования оценок, полученных студентом за каждый компонент формируемых компетенций, с учетом результатов текущего и рубежного контроля в виде интегральной оценки по 5-ти балльной шкале. Все результаты контроля заносятся в оценочный лист и заполняются преподавателем по итогам промежуточной аттестации.

Форма оценочного листа и требования к его заполнению приведены в общей части ФОС образовательной программы.

При формировании итоговой оценки промежуточной аттестации в виде зачета используются типовые критерии, приведенные в общей части ФОС образовательной программы.