

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

« 17 » декабря 20 19 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина: _____ **Дискретные математические модели** _____
(наименование)

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

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

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

Направление подготовки: _____ **01.04.02 Прикладная математика и информатика** _____
(код и наименование направления)

Направленность: _____ **Математическая кибернетика** _____
(наименование образовательной программы)

1. Общие положения

1.1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины: формирование комплекса знаний, умений и навыков в области построения дискретных математических моделей, их анализа и применения к исследованию физико-механических процессов на нано-, микро- и макро- уровнях, происходящих в конденсированных средах в результате внешних термомеханических воздействий.

Задачи дисциплины:

- изучение принципов построения дискретных математических моделей для проведения научного исследования физико-механических процессов на различных уровнях организации материи — от наночастиц до макроскопических объемов конденсированных сред;
- формирование умения выделять структурные элементы на рассматриваемом уровне организации материи, описывать законы их физического взаимодействия и эволюции на языке математики, обосновывать необходимость выбора дискретного или континуального подхода для описания исследуемых физико-механических процессов;
- формирование умения переходить от концептуальной формулировки дискретной математической модели к ее математической постановке и применять методы вычислительной математики для получения решений научно-исследовательских и прикладных задач в области физики и механики с помощью построенных дискретных математических моделей;
- формирование навыков применения методов математического моделирования и вычислительной математики при компьютерной реализации дискретных математических моделей, навыков работы с пакетами прикладного программного обеспечения, а также навыков анализа получаемых результатов и их применения для решения научно-исследовательских и прикладных задач.

1.2. Изучаемые объекты дисциплины

- тела с кристаллическим строением от наночастиц до макроуровня;
- дислокации и пластическое течение в металлах;
- процессы диффузии в жидкостях и пористых телах;
- ударные волны в жидкостях и газах.

1.3. Входные требования

Поскольку дискретные математические модели конденсированных сред должны описывать поведение материальных тел, а также, в той или иной степени, отражать их структуру и строение, то при изучении данного курса используются различные разделы физики, в частности, физика твердого тела, теоретическая механика, термодинамика, а также основы статистической физики. С другой стороны, занимаясь математическим моделированием поведения различных материалов, дисциплина Дискретные математические модели существенно опирается на такие дисциплины и разделы математики, как алгебра, анализ, тензорное исчисление, дифференциальная геометрия, уравнения математической физики и др.

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
-------------	-------------------	---	--	-----------------

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
ОПК-3	ИД-1ОПК-3.	Знает математические модели, применяемые для описания взаимодействия и законов эволюции дискретных элементов структуры в конденсированных средах на различных масштабных уровнях; области и особенности применимости дискретных и континуальных подходов для решения научно-исследовательских и прикладных задач при описании физико-механических процессов в конденсированных средах; основные дискретные элементы структуры, отвечающие за механизмы деформирования в конденсированных средах на различных масштабных уровнях, виды их взаимодействия и законы эволюции;	Знает особенности применения методов математического моделирования, а также методов вычислительной математики при решении научных и прикладных задач.	Собеседование
ОПК-3	ИД-21ОПК-0	Обосновывает и выбирает известные или формулирует новые математические модели для описания взаимодействия и законов эволюции выбранных дискретных элементов структуры при построении дискретных математических моделей для теоретического исследования физико-механических процессов в конденсированных средах. Обосновывает и выбирает элементы структуры для разработки дискретных математических моделей физико-механических	Умеет создавать математические модели и использовать их в научной и познавательной деятельности, обосновывать применение методов вычислительной математики в научной и познавательной деятельности.	Отчёт по практическому занятию

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
		процессов в конденсированных средах.		
ОПК-3	ИД-31ОПК-0	Использует и применяет методы математического моделирования и вычислительной математики при компьютерной реализации дискретных математических моделей физико-механических процессов в конденсированных средах; Использует пакеты прикладного программного обеспечения для реализации дискретных математических моделей и проведения вычислительного эксперимента.	Владеет навыками профессиональными навыками создания и использования в научной и познавательной деятельности математических моделей, а также методов вычислительной математики	Зачет
ПКО-1	ИД-1ПКО-01	Знает подходы к проведению научных исследований в области математического моделирования; методы анализа и обработки исследовательских данных; методы, направленные на решение задач аналитического характера, предполагающих выбор и многообразие актуальных способов решения задач;	Знает методы анализа научных данных; методы и средства планирования и организации исследований и разработок	Собеседование
ПКО-1	ИД-2ПКО-01	Анализирует, систематизирует и обобщает различные виды информации в рамках исследования; формулирует выводы по полученным результатам и доводит их до научной общественности в форме научных докладов, тезисов, статей, презентаций и т.п.; оформляет результаты	Умеет оформлять результаты научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ	Индивидуальное задание

Компетенция	Индекс индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (знать, уметь, владеть)	Индикатор достижения компетенции, с которым соотнесены планируемые результаты обучения	Средства оценки
		научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ.		
ПКО-1	ИД-3ПКО-01	Выполняет этапы разработки концептуальных и теоретических моделей в рамках дискретного подхода. Осуществляет разработку планов и методических программ проведения исследований и разработок. Разрабатывает элементы планов проведения исследований и разработок, проверки правильности результатов.	Владеет навыками осуществления разработки планов и методических программ проведения	Зачет

3. Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		3	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	36	36	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)			
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	34	34	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72	
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
3-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Дискретные математические модели в физике и механике конденсированных сред	0	0	22	60
<p>Тема 1. Об истории дискретного математического моделирования в физике и механике. История формирования дискретно-атомистического подхода к определению физико-механических свойств конденсированных сред от Коши до наших дней. Методы молекулярной динамики и статики. Сведения о видах взаимодействия атомов и о потенциалах, описывающих различные виды связей. Примеры применения дискретно-атомистического подхода к определению числа независимых упругих модулей кристаллических тел. Спор о числе упругих модулей: подход Коши, подход Грина.</p> <p>Тема 2. Статический подход к исследованию физико-механических свойств материалов с кристаллическим строением при низких температурах. Построение дискретных геометрических моделей кристаллических решеток металлов (ГЦК, ОЦК, ГПУ) и углеродных материалов (графен, графит). Вычисление полной потенциальной энергии кристаллических решеток при низких температурах, определение отсчетной естественной (ненапряженной и недеформированной) конфигурации различных кристаллических решеток. Зависимость равновесного межатомного расстояния от размера образца.</p> <p>Тема 3. Переходные процессы в одномерной бесконечной цепочке атомов. Периодические граничные условия. Построение одномерного периодического потенциала взаимодействия атомов. Численное исследование бесконечной одномерной решетки атомов в динамическом подходе. Определение естественного состояния, возмущение естественного состояния, переход в новое равновесное состояние. Вычисление потенциальной, кинетической и полной энергии, их эволюция с течением времени. Вычисление равновесного межатомного расстояния в динамической системе взаимодействующих атомов. Вычисление меры температуры цепочки атомов, зависимость равновесного межатомного расстояния от меры температуры в одномерном случае.</p> <p>Тема 4. Двухкомпонентная одномерная бесконечная цепочка атомов. Вычисление упругих модулей двухкомпонентной</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>цепочки атомов. Правило смешения Бергло-Лоренца. Зависимость упругих модулей от фазового состава и дисперсности фаз. Вычисление градиентных упругих свойств.</p> <p>Тема 5. Определение числа независимых упругих модулей для различных кристаллических решеток. Группа симметрии тензора линейно-упругих свойств. Влияние класса симметрии структуры материала на число независимых ненулевых компонент тензора линейно-упругих свойств. Разработка программы в пакете символьных вычислений для определения числа независимых упругих модулей для материалов с ГЦК, ОЦК, ГПУ решетками, графита и двумерного материала с решеткой графена. Выражение компонент тензора линейно-упругих свойств через производные от удельной потенциальной энергии деформирования линейно-упругих твердых тел.</p> <p>Тема 6. Вычисление упругих модулей для конечных тел с кристаллическим строением при низкой температуре в статическом подходе. Получение «быстрых сумм» для расчета упругих модулей в статическом подходе. Вычисление упругих модулей в зависимости от размеров образца. Упругие свойства наночастиц. Идентификация параметров потенциалов межатомного взаимодействия. Предельный переход от наноуровня к физико-механическим свойствам микро- и макроскопических объемов.</p> <p>Тема 7. Метод контроля температуры в статическом подходе.</p> <p>Сведения из молекулярно-кинетической теории и термодинамики твердых тел. Построение возмущенных конфигураций атомов при заданной амплитуде возмущений и равномерном распределении направлений смещений в пространстве. Проблема построения равномерного распределения на единичной сфере. Функция распределения величины смещения, соответствующая представлению атома как гармонического осциллятора при заданной амплитуде тепловых колебаний. Минимизация потенциальной энергии в каждой реализации возмущенных конфигураций при заданной амплитуде смещений. Моделирование процесса нагрева кристаллического тела. Вычисление физико-механических свойств в каждой возмущенной конфигурации атомов. Осреднение свойств по реализациям. Связь амплитуды возмущений положений атомов с температурой решетки, мера температуры. Зависимость</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
равновесного межатомного расстояния, удельной потенциальной энергии, упругих свойств от меры температуры для различных кристаллических решеток. Получение точек структурных и фазовых превращений кристаллических тел.				
Имитационный подход в дискретном моделировании	0	0	12	12
<p>Тема 8. Метод клеточных автоматов в дискретном математическом моделировании физико-механических процессов. Сведения о клеточных автоматах, история метода, виды окрестностей. Окрестность Марголуса для моделирования физико-механических процессов. Правила клеточного автомата для моделирования процессов диффузии, течения вязких жидкостей, распространения ударных волн в жидкостях и газах. Реализация подхода клеточных автоматов для перечисленных процессов в вычислительной среде на компьютере.</p> <p>Тема 9. Метод клеточных автоматов в моделировании процессов диффузии Вычислительный эксперимент по описанию диффузии в двухкомпонентной среде. Сопоставление решений, полученных дискретным методом клеточных автоматов и численным методом решения классического дифференциального уравнения диффузии. Дискретное математическое моделирование процесса диффузии в пористой среде. Учет движения среды. Анализ полученных результатов. Практическое применение результатов для оценки зон распространения загрязнений от промышленных объектов.</p> <p>Тема 10. Метод клеточных автоматов в моделировании процесса движения дислокаций и образования дислокационных структур в металлах. Правила клеточного автомата для движения дислокаций в системе скольжения. Реализация вычислительного эксперимента. Анализ получаемых конфигураций дислокаций. Применение результатов для описания законов упрочнения по системам скольжения и типов дислокационных субструктур.</p>				
ИТОГО по 3-му семестру	0	0	34	72
ИТОГО по дисциплине	0	0	34	72

Тематика примерных практических занятий

№ п.п.	Наименование темы практического (семинарского) занятия
1	Об истории дискретного математического моделирования в физике и механике
2	Статический подход к исследованию физико-механических свойств материалов с кристаллическим строением при низ-ких температурах
3	Переходные процессы в одномерной бесконечной цепочке атомов
4	Двухкомпонентная одномерная бесконечная цепочка атомов
5	Определение числа независимых упругих модулей для различных кристаллических решеток
6	Вычисление упругих модулей для конечных тел с кристаллическим строением при низкой температуре в статическом подходе
7	Метод контроля температуры в статическом подходе
8	Метод клеточных автоматов при дискретном математическом моделировании физико-механических процессов
9	Метод клеточных автоматов при моделировании процессов диффузии
10	Метод клеточных автоматов при моделировании процесса движения дислокаций и образования дислокационных структур в металлах

5. Организационно-педагогические условия

5.1. Образовательные технологии, используемые для формирования компетенций

Проведение 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.

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, лабораторным работам и индивидуальным комплексным заданиям на самостоятельную работу.
4. Вся тематика вопросов, изучаемых самостоятельно, задается преподавателем. Им же даются источники (в первую очередь вновь изданные в периодической научной литературе).

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	Зубко И. Ю. Математическое моделирование: дискретные подходы и численные методы : учебное пособие для вузов / И. Ю. Зубко, Н. Д. Няшина. - Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2012.	5
2. Дополнительная литература		
2.1. Учебные и научные издания		
1	Введение в математическое моделирование : учебное пособие / В. Н. Ашихмин [и др.]. - М: Логос, 2007.	37
2	Воробьев Е. М. Введение в систему Математика : учебное пособие для вузов / Е. М. Воробьев. - М.: Финансы и статистика, 1998.	5
3	Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика : учебное пособие для вузов / М. А. Леонтович. - Москва: Наука, Физматлит, 1983.	5
4	Порошковые механически легированные азотистые стали с нанофазами / В. Н. Анциферов [и др.]. - Екатеринбург: УрО РАН, 2010.	2
2.2. Периодические издания		
1	Вестник ПНИПУ. Механика : журнал / Пермский национальный исследовательский политехнический университет ; Под ред. А. А. Ташкинова. - Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2012	
2	Вычислительная механика сплошных сред : журнал / Российская академия наук, Уральское отделение; Институт механики сплошных сред. - Пермь: ИМСС УрО РАН, 2008 - .	
3	Физика твердого тела : журнал / Российская академия наук. Отделение физических наук; Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе. - Санкт-Петербург: Наука, 1959 - .	
4	Физическая мезомеханика : журнал / Российская академия наук. Сибирское отделение; Институт физики прочности и материаловедения. - Томск: Ин-т физики прочности и материаловедения СО РАН, 1998 - .	
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	Введение в математическое моделирование : учебное пособие для вузов / В. Н. Ашихмин [и др.]. - Москва: Логос, 2004.	http://elib.pstu.ru/Record/RUPNRPUelib2392	локальная сеть; авторизованный доступ
Основная литература	Зубко И. Ю. Математическое моделирование: дискретные подходы и численные методы : учебное пособие для вузов / И. Ю. Зубко, Н. Д. Няшина. - Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2012.	http://elib.pstu.ru/Record/RUPNRPUelib3502	сеть Интернет; свободный доступ

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

Вид ПО	Наименование ПО
Операционные системы	Windows 10 (подп. Azure Dev Tools for Teaching)
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	MATLAB 7.9 + Simulink 7.4 Academic, ПНИПУ 2009 г.

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

Наименование	Ссылка на информационный ресурс
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/
Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки	http://www.diss.rsl.ru/

7. Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине

Вид занятий	Наименование необходимого основного оборудования и технических средств обучения	Количество единиц
Практическое занятие	Видеопроектор	1
Практическое занятие	Ноутбук	1
Практическое занятие	Персональные компьютеры (локальная компьютерная сеть)	10

8. Фонд оценочных средств дисциплины

Описан в отдельном документе