

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Б1.В.04
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Математическое моделирование и современные проблемы наук о материалах и
процессах

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки
22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

направленность (профиль)
Инжиниринг перспективных материалов и диагностика поведения материалов в изделиях

Форма обучения: очная

Год набора: 2020

Общая трудоемкость: 3 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	1	Итого
Форма контроля	Зачет	
Вид занятий		
Лекции	8	8
Лабораторные		
Практические	16	16
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,3	0,3
Контактная работа	24,25	24,25
Самостоятельная работа	84	84
Контроль		
Итого	108	108

Рабочую программу составил(и):

Доцент, к.т.н. Селиванов А.С.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

Срок действия рабочей программы дисциплины до «30» августа 2022г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании кафедры

«Нанотехнологии, материаловедение и механика»

(протокол заседания № 1 от «30» августа 2019 г.).

3. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – научиться использовать методы математического моделирования материалов, их структуры и свойств и моделированием определять существующие проблемы в области материаловедения и технологии материалов и покрытий.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина:

Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве; Структура и свойства металлических кластеров нано- и микрообъектов.

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: Учебная практика (ознакомительная практика); Производственная практика (научно-исследовательская работа) 2; Методы исследования, контроля и диагностики материалов; Механизмы деформации и разрушения наноматериалов 1, 2.

3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК-1 Способен понимать физические и химические процессы, протекающие в материалах при их получении, обработке и модификации, использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств веществ (материалов), проводить комплексные исследования, применяя стандартные и сертификационные испытания	ПК-1.2 Способен использовать в расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств веществ (материалов)	Знать: основные методы расчета и моделирования материалов, их структуры и свойств; знать методологию анализа и диагностики материалов и веществ
		Уметь: рассчитывать и моделировать материалы, их структуру и свойства
		Владеть: навыками расчета и моделирования материалов и веществ, навыками анализа и диагностики материалов и прогнозирования их свойств

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Модуль 1. Математическое моделирование высокопрочных сталей	Лек	Математическое моделирование малых кластеров (на примере Cu_n).	1	2	-	-	Отчет о выполнении практической работы.
	Пр	Моделирование материалов с использованием метода молекулярной динамики (МД). Практическая работа № 1. Молекулярно-динамическая модель плавления кристаллического образца и определение минимума потенциальной энергии кластеров атомов вещества	1	4	-	-	
Модуль 2. Проблемы получения и применения высокопрочных сталей	Лек	Способы упрочнения и основные проблемы мартенситно-старееющих, сверхмелкозернистых и метастабильных аустенитных сталей и области их применения.	1	1	-	-	
	Пр	Практическая работа № 2. Способы упрочнения и основные проблемы мартенситно-старееющих, сверхмелкозернистых и метастабильных аустенитных сталей.	1	2	-	-	Отчет о выполнении практической работы.
	Лек	Проблемы получения, упрочнения и применения сталей, легированных азотом. Проблемы реализации метода ультразвуковой дефектоскопии	1	1	-	-	
	Пр	Практическая работа № 3. Получение, упрочнение и применение сталей, легированных азотом.	1	2	-	-	Отчет о выполнении практической работы

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек	Проблемы получения, упрочнения и применения алюминиевых сплавов.	1	1	-	-	
Модуль 2. Проблемы получения и применения высокопрочных сталей	Пр	Практическая работа № 4. Получение, упрочнение и применение алюминиевых сплавов.	1	2	-	-	Отчет о выполнении практической работы
	Лек	Применение современных методик высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии для решения проблем материаловедения.	1	1	-	-	
	Лек	Проблемы получения и применения наноматериалов. Нанопорошки и наночастицы.	1	1	-	-	
	Пр	Практическая работа № 5. Получение и применения наноматериалов. Использование нанопорошков и наночастиц.	1	4	-	-	Отчет о выполнении практической работы
	Лек	Проблемы получения и применения наноматериалов. Наноструктурированные материалы	1	1	-	-	
	Пр	Практическая работа № 6. Получение и применение аморфных сплавов.	1	2	-	-	Отчет о выполнении практической работы
Итого:				24			

5. Образовательные технологии

В настоящем курсе используются следующие образовательные технологии: технология традиционного обучения - лекции с применением мультимедийных средств; практические работы выполняются на компьютере с применением программного обеспечения для моделирования поставленной задачи; самостоятельная работа

6. Методические указания по освоению дисциплины

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	ПК-1	Собеседование; Вопросы к зачету №№ 1-34; Практическая работа № 1-6

7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

7.2.1. Практические работы

(наименование оценочного средства)

Типовые примеры заданий

Практическая работа № 1. Молекулярно-динамическая модель плавления кристаллического образца и определение минимума потенциальной энергии кластеров атомов вещества

Задание № 1. Анализ классических уравнений молекулярной динамики. Выбор формы представления потенциала.

Задание № 2. Составление системы уравнений в виде конечных разностей.

Задание № 3. Выбор исходных данных по вариантам (таблица 1)

Таблица 1. Исходные данные для моделирования задачи о плавлении кристаллического образца

№ варианта	Число атомов в кристаллическом образце	Кол-во атомов в кластере	Кол-во шагов интегрирования	Амплитуда начальной скорости атомов	Шаг численного интегрирования
1	1000	64	15	0,3	0,05
2	1500	128	20	0,2	0,07
3	700	32	10	0,15	0,05
4	1000	128	20	0,3	0,05
5	1000	64	25	0,3	0,05
6	1200	128	25	0,1	0,01
7	500	32	7	0,4	0,05
8	750	64	10	0,3	0,01
9	1000	128	15	0,35	0,05
10	1500	64	20	0,3	0,07
11	2000	64	30	0,3	0,07
12	1000	128	15	0,4	0,05
13	500	32	15	0,3	0,05
14	1700	128	30	0,25	0,04
15	2000	64	30	0,4	0,07
16	1000	128	20	0,35	0,05
17	800	32	25	0,3	0,05
18	1000	128	10	0,1	0,01

19	1500	64	15	0,4	0,05
20	700	64	20	0,3	0,01
21	1000	128	30	0,35	0,05
22	1000	32	15	0,3	0,07
23	1200	128	15	0,3	0,07
24	1000	64	30	0,4	0,05
25	1500	128	10	0,1	0,05

Задание № 4. Составление листинга программы в MATLAB. Запуск программы. Выполнение компьютерного эксперимента.

Задание № 5. Анализ полученных результатов

Критерии оценки практической работы:

«Зачтено» выставляется студенту, если все задание на практическую работу выполнены верно, выводы сделаны грамотно и обосновано. Представлен листинг кода программы и результаты моделирования среде MATLAB. По теме практической работы даны ответы на вопросы преподавателя.

«Не зачтено» выставляется студенту, если практическая работа не выполнена полностью или не составлены уравнения молекулярной динамики в виде конечных разностей, не разработан листинг кода в среде MATLAB и не проведено виртуальное моделирование.

Практическая работа № 2. Способы упрочнения и основные проблемы мартенситно-стареющих, сверхмелкозернистых и метастабильных аустенитных сталей.

Творческое задание № 1: Анализ микроструктуры пакетного мартенсита. Классификация и получение мартенситно – стареющих сталей на основе тройных систем. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемым вопросам (5-7 слайдов)

Творческое задание № 2: Вопросы упрочнения мартенситно – стареющих сталей. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемому вопросу (5-7 слайдов)

Практическая работа № 3. Получение, упрочнение и применение сталей, легированных азотом.

Творческое задание к практической работе № 3: Проблема получения, изучения структуры и свойств азотистых сталей. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемым вопросам (5-7 слайдов)

Критерии оценки творческих заданий к практическим работам:

«Зачтено» выставляется студенту, если в результате работы полностью раскрыта тема творческих заданий, составлена и оформленная презентация. Студент активно участвует в обсуждении презентации и правильно отвечает на все поставленные вопросы

«Не зачтено» выставляется студенту, если в результате работы презентация не представлена и тема не проработана

Практическая работа № 4. Получение, упрочнение и применение алюминиевых сплавов.

Творческое задание к практической работе № 4: Основная проблема использования интерметаллидов с использованием алюминиевых сплавов. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемым вопросам (5-7 слайдов)

Практическая работа № 5. Получение и применения наноматериалов. Использование нанопорошков и наночастиц.

Творческое задание к практической работе № 5: Рассмотреть классификацию и свойства наноматериалов. Подробно рассмотреть фуллерены и их производные, и нанотрубки. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемым вопросам (5-7 слайдов)

Практическая работа № 6. Получение и применение аморфных сплавов.

Творческое задание к практической работе № 6: Проблема получения и применения, изучения структуры и свойств аморфных сплавов. Подготовка презентации в PowerPoint по рассматриваемым вопросам (5-7 слайдов)

7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 1

№ п/п	Вопросы к зачету
1.	Численное дифференцирование
2.	Численное интегрирование
3.	Сущность метода конечных разностей
4.	Метод молекулярной динамики
5.	Метод частиц
6.	Краевая задача. Разностный метод
7.	Аппроксимация начальных и граничных условий
8.	Понятие «конструкционной прочности», ее составляющие.
9.	Понятие «высокопрочная сталь», условность его применения
10.	Факторы упрочнения сплавов. Зернограничное упрочнение
11.	Факторы упрочнения сплавов. Упрочнение дисперсными частицами.
12.	Факторы упрочнения сплавов. Субструктурное упрочнение
13.	Проблемы создания, обработки и применения мартенситно-старееющих сталей.
14.	Проблемы создания, обработки и применения сталей со сверхмелким зерном
15.	Проблемы создания, обработки и применения метастабильных аустенитных сталей
16.	Проблемы создания, обработки и применения автомобильных кузовных сталей
17.	Проблемы применения автомобильных кузовных сталей повышенной прочности
18.	Проблемы применения автомобильных кузовных двухфазных сталей
19.	Проблемы создания, обработки и применения борсодержащих сталей
20.	Проблемы создания, обработки и применения азотистых сталей
21.	Проблемы создания, обработки и применения сталей для изготовления труб
22.	Проблемы создания, обработки и применения цементуемых и

	нитроцементуемых изделий.
23.	Проблемы применения метода растровой электронной микроскопии
24.	Проблемы применения метода просвечивающей электронной микроскопии
25.	Сущность и преимущества методов зондовой микроскопии
26.	Проблемы применения метода сканирующей туннельной микроскопии
27.	Проблемы применения метода атомно-силовой микроскопии
28.	Проблемы применения метода акустической эмиссии
29.	Проблемы применения метода ультразвуковой дефектоскопии
30.	Проблемы создания, обработки и применения композиционных дисперсноупрочненных материалов
31.	Проблемы создания, обработки и применения волокнистых композиционных материалов
32.	Проблемы создания, обработки и применения аморфных сплавов
33.	Проблемы создания, обработки и применения нанопорошков и наночастиц
34.	Проблемы создания, обработки и применения наноструктурированных материалов

7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
1	Зачет	«зачтено»	ставится студенту, если он исчерпывающе и грамотно дал ответы на вопросы или при ответе допустил небольшую неточность на один вопрос, но при этом смог грамотно ответить на дополнительные вопросы
		«не зачтено»	ставится студенту, если он не дал ответ на вопросы или в ответе содержались фундаментальные ошибки по материалам курса

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1.	Кручинин Н.Ю.	Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макро-молекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах	учебное пособие	2015	ЭБС « IPRbooks »
2.	Семенов М.Е., Некрасова Н.Н.	Математическое моделирование физических процессов	учебное пособие	2016	ЭБС « IPRbooks »
3.	Семин А.Е., Алпатов А.В., Котельников Г.И.	Современные проблемы металлургии и материаловедения: практикум	учебное пособие	2015	ЭБС «Лань»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
	Юрчук С.Ю.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики	курс лекций	2013	ЭБС «Лань»

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- Российские нанотехнологии [Электронный ресурс] : Российские нанотехнологии международный научный журнал. Учредитель журнала: Федеральное агентство по науке и инновациям РФ. – Режим доступа к журналу: <https://www.nanorrf.ru>;
- Научно-технический журнал «Письма о материалах». Учредитель журнала: Российская академия наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Башкирский государственный университет. – Режим доступа к журналу: <http://lettersonmaterials.com/ru/Readers/Volumes.aspx>;
- Chemistry and Materials Research Журнал на английском языке Международного института по науке, технологиям и образованию (International Institute for Science, Technology and Education) (США, Великобритания, Гонконг). Режим доступа к журналу: <http://www.iiste.org/Journals/index.php/CMR/issue/archive>;
- Web of Science [Электронный ресурс] : мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: Clarivate Analytics, 2016– . – Режим доступа : apps.webofknowledge.com. – Загл. С экрана. – Яз. Рус., англ.;
- Scopus [Электронный ресурс] : реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004– . – Режим доступа : [scopus.com](https://www.scopus.com). – Загл. С экрана. – Яз. Рус., англ.;

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1.	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно; контракт № 1653 от 14.12.2018, срок действия – бессрочно
2.	OfficeStd 2019 RUS OLP NL Acdmc	№ 1653 от 14.12.2018, срок действия - бессрочно
3.	Mathcad Education - University Edition Subscription (25 pack)	№ 469 от 05.06.2020, срок действия - бессрочно
4.	Mirapolis Human Capital Management	лицензионный договор № 234/10/21-К от 19.10.2021, срок действия – до 01.03.2022

8.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1.	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа.	Столы ученические двухместные , столы ученические, стол

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
	Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации (Е-214)	компьютерный, стол преподавательский, ПК, доска трехсекционная аудиторная (меловая), стул преподавательский, проектор мультимедийный ,экран для проектора, тумба выкатная
2.	Помещение для самостоятельной работы обучающихся (Г-401)	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет
3.	Помещение для самостоятельной работы обучающихся (Д-409)	Столы-парты двухместные, стулья, стол преподавательский-, стул преподавательский, передвижная доска, экран, процессор, проектор, компьютерные столы, компьютеры для студентов с выходом в сеть интернет, компьютер преподавателя.