

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)
Гибридные и комбинированные технологии

Форма обучения: очная

Год набора: 2024

Общая трудоемкость: 3 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	1	Итого
Вид занятий	зачет	
Лекции	8	8
Лабораторные	-	-
Практические	16	16
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР	-	-
Промежуточная аттестация	0,25	0,25
Контактная работа	24,25	24,25
Самостоятельная работа	83,75	83,75
Контроль	-	-
Итого	108	108

Рабочую программу составил(и):

Доцент кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика»,

к.т.н., доцент 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 «01» сентября 2026г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика» института машиностроения Передовой инженерной школы «Гибридные и комбинированные технологии»

(протокол заседания № 14 от «31» мая 2024 г.)

1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины – формирование у обучающихся компетенций в области применения математического моделирования для решения современных проблем в науках о материалах и технологических процессах, а также развитие навыков анализа, прогнозирования и оптимизации свойств материалов и технологических процессов с использованием математических методов и современных программных средств.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина:
Компьютерное программирование и моделирование материалов и изделий.

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: учебная практика (ознакомительная практика); производственная практика (научно-исследовательская работа) 1; материаловедение и технология современных и перспективных материалов.

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-1.1. Умеет обоснованно выбирать методы исследования, анализа и моделирования свойств материалов в зависимости от поставленной задачи и типа материала.	Знать: Типовые задачи и подходы к их решению в области математического моделирования свойств материалов.
		Уметь: применять математические модели для решения прикладных задач в области материаловедения, корректируя их в соответствии с особенностями исследуемых материалов.
		Владеть: методами выбора и обоснования подходов к моделированию с учетом специфики задач в области наук о материалах.
	ПК-1.2. Анализирует структуру и свойства материала с помощью различных методов исследования	Знать: современные методы исследования структуры и свойств материалов, включая дифракционные, микроскопические, и спектроскопические методы. Уметь: применять различные методы исследования для анализа структуры и свойств материалов.

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
		Владеть: навыками использования исследовательского оборудования и программных комплексов для анализа структуры и свойств материалов.
	ПК-1.3. Осуществляет теоретическое обобщение научных данных, результатов экспериментов и наблюдений	Знать: основные этапы и подходы к обобщению результатов экспериментов и наблюдений в области материаловедения.
		Уметь: проводить теоретический анализ и обобщение научных данных, полученных в результате экспериментов и наблюдений.
		Владеть: навыками систематизации и анализа научных данных с целью обобщения и выработки рекомендаций.

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.1	Математическое моделирование малых кластеров (на примере C_{60}).	1	2			
	СР	Подготовка к практической работе 1	1	14			
	Пр.1	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			Отчет о выполнении практической работы 1
Модуль 2. Проблемы получения и применения высокопрочных сталей	Лек.2	Способы упрочнения и основные проблемы мартенситно-стареющих, сверхмелкозернистых и метастабильных аустенитных сталей и области их применения	1	1			
	СР	Подготовка к практической работе 2	1	14			
	Пр.2	Способы упрочнения и основные проблемы мартенситно-стареющих, сверхмелкозернистых и метастабильных	1	2			Отчет о выполнении практической работы 2
	Лек.3	Проблемы получения, упрочнения и применения сталей, легированных азотом. Проблемы реализации метода ультразвуковой дефектоскопии	1	1			
	СР	Подготовка к практической работе 3	1	14			
	Пр.3	Практическая работа № 3. Получение, упрочнение и применение сталей, легированных азотом.	1	2			Отчет о выполнении практической работы 3
	Лек.4	Проблемы получения, упрочнения и применения алюминиевых сплавов.	1	1			

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий(учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	СР	Подготовка к практической работе 4	1	14			
Модуль 2. Проблемы получения и применения высокопрочных сталей	Пр.4	Практическая работа № 4. Получение, упрочнение и применение алюминиевых сплавов.	1	2			Отчет о выполнении практической работы 4
	Лек.5	Применение современных методик высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии для решения проблем	1	1			
	Лек.6	Проблемы получения и применения наноматериалов. Нанопорошки и наночастицы.	1	1			
	СР	Подготовка к практической работе 5	1	14			
	Пр.5	Практическая работа № 5. Получение и применения наноматериалов.Использование нанопорошков и наночастиц.	1	4			Отчет о выполнении практической работы 5
	Лек.7	Проблемы получения и применения наноматериалов. Наноструктурированные материалы	1	1			
	СР	Подготовка к практической работе 6	1	13,75			
	Пр.6	Получение и применение аморфных сплавов.	1	2			Отчет о выполнении практической работы 6
	ПА		1	0,25			
Итого:				108			

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

При подготовке к практическим занятиям и экзамену, обучающимися необходимо тщательно изучить предлагаемую литературу, лекционный материал, а также выполнять все задания преподавателя, предусмотренные программой. Для закрепления теоретических знаний по изучаемым на лекциях проблемам проводятся практические занятия, где обучающийся выполняет задания по темам дисциплины в целях формирования практических навыков.

Самостоятельная работа студентов (СРС) – работа с лекционным материалом, подготовка к практическим занятиям, изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку; подготовка к экзамену.

Самостоятельная работа студентов проводится с целью углубления и расширения теоретических знаний; развития познавательных способностей и активности студентов; самостоятельности, ответственности и организованности, творческой инициативы; формирования самостоятельности мышления, способности к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации.

Контроль выполненной самостоятельной работы осуществляется индивидуально. Обучающийся самостоятельно работает с дополнительной и основной литературой, нормативными актами, интернет-ресурсами.

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 № 1-49; Практическая работа № 1-6

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

7.2.1. Отчет по практическим работам

(наименование оценочного средства)

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).

Форма отчета по практическим работам

В отчет по практической работе должны быть включены следующие пункты:

- титульный лист;
- цель работы;
- краткие теоретические сведения;
- описание хода выполнения работы;
- результаты выполненной работы;

- ответы на контрольные вопросы.

Краткое описание и регламент выполнения

К выполнению практических работ допускаются все студенты.

Выполняются работы согласно индивидуальному варианту задания, предусмотренного в методических рекомендациях.

Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если отчёт выполнен, сформулированы ответы на контрольные вопросы;
- оценка «не зачтено», если отчёт не выполнен или выполнен с грубыми нарушениями, неверные ответы на контрольные вопросы.

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
35.	Что представляет собой математическое моделирование в материаловедении и каковы его основные этапы?
36.	Опишите методы, используемые для моделирования свойств материалов.
37.	Каковы современные проблемы в области наук о материалах и процессах?
38.	Какие математические методы используются для анализа структуры материалов?
39.	В чем заключается роль компьютерных симуляций в исследованиях материалов?
40.	Как осуществляется верификация математических моделей в материалах и процессах?
41.	Какие методы применяются для теоретического обобщения научных данных в материаловедении?
42.	Объясните особенности применения численных методов в моделировании процессов материаловедения.
43.	В чем заключается значение статистического анализа для интерпретации результатов экспериментов в материаловедении?
44.	Опишите процесс интерпретации данных о структуре материалов с помощью математических моделей.
45.	Какие факторы необходимо учитывать при разработке моделей долговечности материалов?
46.	В чем заключается взаимосвязь между микро- и макроуровнями в моделях материалов?
47.	Объясните подходы к решению обратных задач в моделировании процессов в материалах.
48.	Как математическое моделирование способствует решению современных проблем в разработке новых материалов?
49.	Какие современные тенденции в области математического моделирования материалов можно выделить?

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.	Фомин, А. А.	Инженерия поверхности функциональных материалов и численное моделирование физических процессов при индукционной обработке металлов	учебное пособие	2020	ЭБС « IPRbooks »

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
1.	Юрчук С.Ю.	Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики	курс лекций	2013	ЭБС «Лань»
2.	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 »
3.	Семин А.Е., Алпатов А.В., Котельников Г.И.	Современные проблемы металлургии и материаловедения: практикум	учебное пособие	2015	ЭБС «Лань»

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно- методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
4.	Семенов М.Е., Некрасова Н.Н.	Математическое моделирование физических процессов	учебное пособие	2016	ЭБС « <u>IPRbooks</u> »

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1	FREEDOM COLLECTION (Полнотекстовая коллекция электронных журналов Elsevier B.V.)	https://www.sciencedirect.com/
2	Nano Database	http://nano.nature.com/
3	Springer Materials	http://materials.springer.com/
4	Springer Nature Protocols and Methods	https://experiments.springernature.com/sources/springer-protocols
5	zbMath	https://zbmath.org/
6	Springer Nature (Полнотекстовая коллекция журналов)	https://www.springernature.com/gp/products
7	Springer eBooks (Полнотекстовая коллекция электронных книг издательства Springer Nature)	https://link.springer.com/
8	ORBIT INTELLIGENCE (Патентная база компании QUESTEL)	http://www.orbit.com/
9	CSD-ENTERPRISE (База данных компании CAMBRIDGE CRYSTALLOGRAPHIC DATA CENTER)	https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/
10	ELIBRARY.RU (электронная библиотека научных публикаций)	http://elibrary.ru

8.3. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Количество лицензий	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	60	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно
2	Office Standard: Office Stdandard 2016 Russian OLP NL AcademicEdition	60	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно
3.	КОМПАС-3D v 18 (Проектирование и конструирование в машиностроении)	1 (количество рабочих мест – 250)	контракт № 1198 от 18.11.2019, срок действия – бессрочно

8.4. 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. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. 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-306)	Переносной проектор, экран, компьютерные Столы, стол преподавательский, стулья, доска аудиторная, Столы ученические двухместные, ПК
2	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. 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-309)	Стол преподавательский, Столы ученические двухместные (моноблок) , стулья, доска аудиторная (меловая), кафедра, проектор, экран, процессор, шкафы
3	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. 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-304)	Компьютерные столы, стол преподавательский, стулья, доска аудиторная (меловая), Столы ученические, компьютеры.

4	<p>Специальное образовательное пространство «Региональный авторизованный учебный центр САПР»</p> <p>Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. 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.</p> <p>ИТП-211</p>	<p>Стол преподавательский, стулья, стенды, шкафы, столы, персональные компьютеры.</p>
5	<p>Специальное образовательное пространство «Региональный авторизованный учебный центр САПР»</p> <p>Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. 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.</p> <p>ИТП-212</p>	<p>Стол преподавательский, стулья, стенды, шкафы, столы, персональные компьютеры.</p>
6	<p>Помещение для самостоятельной работы обучающихся Г-401</p>	<p>Стол, стулья, компьютеры.</p>
7	<p>Помещение для самостоятельной работы обучающихся Д-409</p>	<p>Стол-парта двухместные, стулья, стол преподавательский, стул преподавательский, передвижная доска, экран, процессор, проектор, компьютерные столы, компьютеры для студентов с выходом в сеть интернет, компьютер преподавателя, сетевой шкаф.</p>