ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных наук

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
ЮУрГУ
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Замышляева А. А.
Пользователь: zamyshliaevaaa
Дата подписания: 05.02.2022

А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.01 Математическое моделирование устройств и систем
для направления 11.04.04 Электроника и наноэлектроника
уровень Магистратура
форма обучения очная
кафедра-разработчик Физика наноразмерных систем

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника, утверждённым приказом Минобрнауки от 22.09.2017 № 959

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ.-мат.н., доц.

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
ЮУрГУ
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Воронцов А. Г.
Пользователь: vorontsovag
Дата подписания: 05.02.2022

А. Г. Воронцов

Разработчик программы,
к.физ.-мат.н., доцент

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
ЮУрГУ
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Соболев А. Н.
Пользователь: sobolevan
Дата подписания: 05.02.2022

А. Н. Соболев

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления
д.физ.-мат.н., проф.

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
ЮУрГУ
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Мирзоев А. А.
Пользователь: mirzoevaa
Дата подписания: 05.02.2022

А. А. Мирзоев

Челябинск

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины "Математическое моделирование устройств и систем" является обучение студентов широкому спектру современных методов и техник моделирования систем различного генеза и пространственно-временных масштабов. Ее задачи: - дать студентам понимание принципов теоретического и компьютерного описания материи на различных пространственно-временных масштабах; - научить студентов составлять план решения вычислительной задачи и оценивать количество вычислительных ресурсов, требуемых для ее решения; - научить студентов определять наилучший алгоритм решения вычислительной задачи по соотношению требуемых вычислительных ресурсов и точности полученного результата.

Краткое содержание дисциплины

В основе многих современных научных и инженерных проблем лежат системы, демонстрирующие интересное поведение на различных масштабах. Для эффективного моделирования таких систем необходимы численные методы, которые могут учитывать влияние более мелких микроскопических масштабов на более крупные макроскопические масштабы без необходимости (непомерно дорогого) полного микроскопического моделирования. Дисциплина "Математическое моделирование устройств и систем" направлена на - предоставление обзора таких численных многомасштабных методов для ряда модельных задач; - объяснение математических свойств этих модельных задач, позволяющих разработать эффективный многомасштабный алгоритм; - установление связи этих модельных задач с приложениями в науке и технике. Дисциплина изучается на первом году магистратуры и рассчитана на студентов, знакомых с научными вычислениями и численными методами.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-3 Способен приобретать и использовать новую информацию в своей предметной области, предлагать новые идеи и подходы к решению инженерных задач	Знает: основные принципы математического моделирования Умеет: разрабатывать математическую модель устройства или явления Имеет практический опыт: построения и использования численных моделей
ОПК-4 Способен разрабатывать и применять специализированное программно-математическое обеспечение для проведения исследований и решения инженерных задач	Знает: принципы применения компьютера для моделирования Умеет: использовать программы и пакеты для реализации численной математической модели Имеет практический опыт: использования программ и пакетов для реализации численной математической модели

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ

Нет	1.О.02 САПР в электронике

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 74,75 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		1	2
Общая трудоёмкость дисциплины	144	72	72
Аудиторные занятия:	64	32	32
Лекции (Л)	32	16	16
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	16	16
Лабораторные работы (ЛР)	0	0	0
Самостоятельная работа (СРС)	69,25	35,75	33,5
с применением дистанционных образовательных технологий	0		
Подготовка к контрольным мероприятиям	49,25	25.75	23.5
Подготовка к экзамену	10	0	10
Подготовка к зачету	10	10	0
Консультации и промежуточная аттестация	10,75	4,25	6,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Метод молекулярной динамики	20	8	12	0
2	Методы Монте-Карло	16	8	8	0
3	Мезоскопические методы	12	8	4	0
4	Методы сплошной среды	16	8	8	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Введение в компьютерное моделирование на молекулярном уровне. Основы метода молекулярной динамики	2
2	1	Межатомные потенциалы в методе молекулярной динамики	2

3	1	Масштабирование скоростей. Термостатирование	2
4	1	Использование молекулярной динамики для определения свойств	2
5	2	Введение в семейство методов Монте-Карло	2
6	2	Алгоритм Метрополиса. Модель Изинга	2
7	2	Модели случайного блуждания. Решеточные модели	2
8	2	Обратное Монте-Карло. Кинетическое Монте-Карло.	2
9	3	Клеточные автоматы. Методы решеточного газа	2
10	3	Методы фазового поля	2
11	3	Методы мезомасштабной динамики	2
12	3	Методы термодинамического моделирования	2
13	4	Конечные разности. Введение в метод конечных элементов	2
14	4	Решение одномерной задачи. Метод Галеркина	2
15	4	Поиск скалярного поля в многомерном случае	2
16	4	Поиск векторного поля в многомерном случае	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	Введение в Linux. Работа с интерфейсом командной строки	2
2	1	Различные методы установки программ в Linux. Установка LAMMPS	2
3	1	Диалект входных файлов LAMMPS. Запуск моделирования	2
4	1	Расчет свойств с использованием МД моделирования	2
5	1	Влияние используемого потенциала и термостата на результат МД моделирования	2
6	1	МД моделирование динамических свойств структуры	2
7	2	Определение числа π методом Монте-Карло	2
8	2	Моделирование системы Леннард-Джонса методом Монте-Карло	2
9	2	Моделирование модели Изинга методом Монте-Карло	4
10	3	Моделирование потоков методом решёточных уравнений Больцмана	4
11	4	Знакомство с пакетом и языком FreeFEM. Установка и запуск пакета	2
12	4	Решение одномерной задачи в FreeFEM	2
13	4	Решение трехмерной задачи в FreeFEM	4

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка к контрольным мероприятиям	Савелова, гл. 3-4, стр. 84-116; Волков и др, гл. 2, стр. 83-158; Персова, Соловейчик, гл. 1-2, стр. 4-93, гл. 4, стр. 137-204	2	23,5
Подготовка к экзамену	Савелова, гл. 3-4, стр. 84-116; Волков и	2	10

	др, гл. 2, стр. 83-158; Персова, Соловейчик, гл. 1-2, стр. 4-93, гл. 4, стр. 137-204		
Подготовка к контрольным мероприятиям	Ибрагимов и др., гл. 5, стр. 158-234, гл. 7, стр. 298-357; Савелова, гл. 2, стр. 57-82	1	25,75
Подготовка к зачету	Ибрагимов и др., гл. 5, стр. 158-234, гл. 7, стр. 298-357; Савелова, гл. 2, стр. 57-82	1	10

6. Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учи-тыва-ется в ПА
1	1	Текущий контроль	Знакомство с Linux	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными ответами на вопросы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	зачет
2	1	Текущий контроль	Установка программ в Linux. Установка LAMMPS	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными ответами на вопросы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	зачет
3	1	Текущий контроль	Запуск моделирования LAMMPS	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными графиками и ответами на вопросы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	зачет
4	1	Текущий контроль	Исследование сходимости результатов, полученных с помощью LAMMPS	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными графиками и ответами на вопросы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	зачет
5	1	Текущий контроль	Влияние используемого потенциала на результат моделирования деформации кристалла в упругом и пластичном	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть входные файлы для LAMMPS, результаты расчетов, графики, и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах	зачет

			режимах			налагается штраф в 1 балл	
6	1	Текущий контроль	Вычисление π методом Монте-Карло	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть программа на любом языке программирования, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	зачет
7	1	Бонус	Бонусные баллы	-	15	Студенту могут быть поставлены бонусные баллы за наличие конспекта лекций. Максимальный балл ставится за наличие всех лекций, отсутствие каждой лекции налагает штраф в 3 балла, 0 баллов ставится за остутствие 5 лекций и более.	зачет
8	1	Проме-жуточная аттестация	Зачет	-	40	На зачете студенту предлагается 2 теоретических и 1 практический вопрос, Теоретические вопросы оцениваются в 10 баллов, практический - 20 баллов. За каждую ошибку/недочет в ответе на каждый вопрос накладывается штраф в 2 балла.	зачет
9	2	Текущий контроль	Моделирование системы Леннард-Джонса методом Монте-Карло	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть программа на любом языке программирования, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	экзамен
10	2	Текущий контроль	Моделирование двумерной модели Изинга методом Монте-Карло	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть программа на любом языке программирования, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	экзамен
11	2	Текущий контроль	Адсорбция воды в трещине кремнезема с использованием большого канонического метода Монте-Карло	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными графиками и ответами на вопросы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	экзамен
12	2	Текущий контроль	Моделирование потоков, управлемых давлением, с	1	5	В качестве ответа на задание принимается заполненный отчет со вставленными ответами на вопросы. Полностью верный отчет	экзамен

			использованием решеточных уравнений Больцмана		оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку налагается штраф в 1 балл	
13	2	Текущий контроль	Решение одномерной задачи теплопроводности методом конечных элементов	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть программа на любом языке программирования, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	экзамен
14	2	Текущий контроль	Решение трехмерной задачи теплопроводности методом конечных элементов	1	5	В качестве ответа на задание принимается отчет, в котором должна быть программа на любом языке программирования, результат или график и сделаны выводы. Полностью верный отчет оценивается в 5 баллов, за каждую ошибку в требуемых компонентах налагается штраф в 1 балл	экзамен
15	2	Бонус	Бонусные баллы	-	15	Студенту могут быть поставлены бонусные баллы за наличие конспекта лекций. Максимальный балл ставится за наличие всех лекций, отсутствие каждой лекции налагает штраф в 3 балла, 0 баллов ставится за остутствие 5 лекций и более.	экзамен
16	2	Проме-жуточная аттестация	Экзамен	-	40	На экзамене студенту предлагается полностью решить предложенную задачу, используя любой известный ему метод по его выбору. Полностью правильное решение оценивается в 40 баллов; ошибки влекут за собой следующие штрафы: в выборе метода - 25 баллов, в построении геометрии модели каждая ошибка - 4 балла; в выборе условий моделирования и в постпроцессинге - 5 баллов.	экзамен

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Контрольное мероприятие промежуточной аттестации не является обязательным. Итоговая оценка может быть поставлена по результатам текущего контроля. Студент может набрать дополнительные баллы, участвуя в мероприятии промежуточной аттестации (экзамене). Экзамен проводится на компьютерах. Продолжительность экзамена - 2 часа. Ответ на билет (входные файлы для пакета или программа) оценивается	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

	в конце экзамена, при этом студенту могут быть заданы несколько дополнительных вопросов по ответу для проверки понимания им материала.	
зачет	Контрольное мероприятие промежуточной аттестации не является обязательным. Зачет может быть поставлен по результатам текущего контроля. Студент может набрать дополнительные баллы, участвуя в мероприятии промежуточной аттестации (зачете). Зачет проводится в течение 90 минут в смешанной форме и включает в себя устный ответ на теоретический вопрос и решение задачи с использованием ПО LAMMPS. Время подготовки - 15 минут для ответа на устный вопрос и 60 минут на решение задачи.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Оценочные материалы

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
ОПК-3	Знает: основные принципы математического моделирования						+		+	+	+	+		+	+	+	+
ОПК-3	Умеет: разрабатывать математическую модель устройства или явления						+			+	+	+		+	+	+	+
ОПК-3	Имеет практический опыт: построения и использования численных моделей						+			+	+	+		+	+	+	+
ОПК-4	Знает: принципы применения компьютера для моделирования	+	+	+	+	+		+	+			+	+			+	+
ОПК-4	Умеет: использовать программы и пакеты для реализации численной математической модели		+	+	+	+		+	+			+	+			+	+
ОПК-4	Имеет практический опыт: использования программ и пакетов для реализации численной математической модели			+	+	+		+	+			+	+			+	+

Фонды оценочных средств по каждому контрольному мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

Не предусмотрена

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Соболев А.Н. Математическое моделирование устройств и систем. Методические материалы для самостоятельной работы студентов

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Соболев А.Н. Математическое моделирование устройств и систем. Методические материалы для самостоятельной работы студентов

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-1032-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/167744 (дата обращения: 03.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Савёлова, Т. И. Метод Монте-Карло : учебное пособие / Т. И. Савёлова. — Москва : НИЯУ МИФИ, 2011. — 152 с. — ISBN 978-5-7262-1546-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/75835 (дата обращения: 03.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Персова, М. Г. Методы конечноэлементного анализа : учебное пособие / М. Г. Персова, Ю. Г. Соловейчик. — 2-е изд. — Новосибирск : НГТУ, 2017. — 204 с. — ISBN 978-5-7782-3374-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/118457 (дата обращения: 03.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках / К. Н. Волков, Ю. Н. Дерюгин, В. Н. Емельянов, А. Г. Карпенко. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2014. — 536 с. — ISBN 978-5-9221-1542-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/59695 (дата обращения: 04.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ANSYS-ANSYS Academic Multiphysics Campus Solution (Mechanical, Fluent, CFX, Workbench, Maxwell, HFSS, Simplorer, Designer, PowerArtist, RedHawk)(бессрочно)
2. Canonical Ltd.-Ubuntu(бессрочно)
3. Sandia National Laboratories-LAMMPS(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника,

	ауд.	предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Практические занятия и семинары	463 (1)	ПК с ОС Ubuntu Linux и установленным специализированным ПО