



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«Дальневосточный федеральный университет»  
(ДФУ)**

**ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ (ШКОЛА)**

СОГЛАСОВАНО

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ОП

Директор департамента ДТФИТ ИНТиПМ

д.п.н., проф. Т.Н. Гнитецкая\_  
(подпись) (ФИО)

д.ф.-м.н., проф. К. В. Нефедев  
(подпись) (И.О. Фамилия)

Научный руководитель ОП

д.ф.-м.н., проф. Л. Л. Афроимов  
(подпись) (ФИО)



20 сентября 2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Математическое моделирование в современном материаловедении

Специальность 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Специализация Фундаментальная физика и информатика

(Совместно с ИАПУ ДВО РАН, ТОИ ДВО РАН)

Форма подготовки: очная

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика, утвержденного приказом Минобрнауки России от 1 марта 2018 г. N 158 (с изменениями и дополнениями) Рабочая программа обсуждена на заседании департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий, протокол № 1 от «20» сентября 2023 г.

Директор департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий д.ф.-м.н., проф. К.В. Нефедев  
Составитель: профессор, д.пед.н. Т.Н. Гнитецкая.

Владивосток  
2023

## Оборотная сторона титульного листа РПД

### **I. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:**

Протокол от «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Директор департамента \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

### **II. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:**

Протокол от «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Директор департамента \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

### **III. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:**

Протокол от «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Директор департамента \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

### **IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий:**

Протокол от «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_\_

Директор департамента \_\_\_\_\_  
(подпись) (И.О. Фамилия)

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### *Математическое моделирование в современном материаловедении*

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётных единицы 108 академических часов. Является дисциплиной части, формируемой участниками образовательных отношений, профессионального блока дисциплин, модуль фундаментальной физики, изучается в 10 семестре и завершается *зачетом*. Учебным планом предусмотрено проведение, лекций – 34 часов лабораторных работ - 36 часов, а также выделены часы на самостоятельную работу студента - 38 часов.

*Язык реализации: русский.*

**Цель:** освоение методов моделирования структур и материалов для проведения численных расчетов на ЭВМ.

**Задачи:**

1. Ознакомление с основами методов моделирования структур и материалов.
2. Обучение использованию программ ЭВМ для решения задач, связанных с автоматизацией в материаловедении, таких как сбор и анализ данных, моделирование материалов и процессов, оптимизация и т.д.
3. Разработка навыков программирования на языке, подходящем для решения задач в материаловедении, например, Python.

В результате прохождения курса студенты должны научиться использовать и создавать программы ЭВМ, которые могут автоматизировать задачи в материаловедении и иметь практический опыт работы с инструментами и библиотеками, необходимыми для решения этих задач.

Дисциплина «Математическое моделирование в современном материаловедении» логически связана с содержанием следующих дисциплин: «Термодинамика и статистическая физика», «Квантовая механика», «Физика конденсированного состояния», «Кристаллография и кристаллофизика», «Вычислительная физика», «Ab-initio вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчеты из первых принципов» и других.

Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
	<p><b>ПК -9</b> Способен вести научно-исследовательскую деятельность в области фундаментальных наук с использованием научной инфраструктуры, соответствующей современным технологическим требованиям</p>	<p><b>ПК-9.1</b> Организация и осуществление научно-исследовательской деятельности в области физики, направленной на развитие междисциплинарных и прикладных исследований</p>	<p>Знает теоретические основы фундаментальной физики, экспериментальное и математическое обоснование теорий и моделей физики; Знает нормы и правила при работе со спектральным оборудованием</p> <p>Умеет получать фундаментальные научные результаты, опираясь на собственную логику развития науки; Умеет проводить расчетные исследования на сертифицированных кодах в рамках поставленной задачи, оценивать погрешность результатов измерений</p> <p>Владеет навыками проведения фундаментальных и поисковых научных исследований в интересах обороны страны и безопасности государства; Владеет навыками проведения экспериментальных измерений на установках и стендах, сопоставления расчетных и экспериментальных данных</p>

## I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ:

**Цель:** освоение методов моделирования структур и материалов для проведения численных расчетов на ЭВМ.

**Задачи:**

1. Ознакомление с основами методов моделирования структур и материалов.
2. Обучение использованию программ ЭВМ для решения задач, связанных с автоматизацией в материаловедении, таких как сбор и анализ данных, моделирование материалов и процессов, оптимизация и т.д.
3. Разработка навыков программирования на языке, подходящем для решения задач в материаловедении, например, Python.

В результате прохождения курса студенты должны научиться использовать и создавать программы ЭВМ, которые могут автоматизировать задачи в материаловедении и иметь практический опыт работы с инструментами и библиотеками, необходимыми для решения этих задач.

Дисциплина «Математическое моделирование в современном материаловедении» логически связана с содержанием следующих дисциплин: «Термодинамика и статистическая физика», «Квантовая механика», «Физика конденсированного состояния», «Кристаллография и кристаллофизика», «Вычислительная физика», «Ab-initio вычисления, квантово-механические и квантово-химические расчеты из первых принципов» и других.

Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
---	---	--	--

	<p><b>ПК -9</b> Способен вести научно-исследовательскую деятельность в области фундаментальных наук с использованием научной инфраструктуры, соответствующей современным технологическим требованиям</p>	<p><b>ПК-9.1</b> Организация и осуществление научно-исследовательской деятельности в области физики, направленной на развитие междисциплинарных и прикладных исследований</p>	<p>Знает теоретические основы фундаментальной физики, экспериментальное и математическое обоснование теорий и моделей физики; Знает нормы и правила при работе со спектральным оборудованием</p> <p>Умеет получать фундаментальные научные результаты, опираясь на собственную логику развития науки; Умеет проводить расчетные исследования на сертифицированных кодах в рамках поставленной задачи, оценивать погрешность результатов измерений</p> <p>Владеет навыками проведения фундаментальных и поисковых научных исследований в интересах обороны страны и безопасности государства; Владеет навыками проведения экспериментальных измерений на установках и стендах, сопоставления расчетных и экспериментальных данных</p>
--	--	---	--

## II. ТРУДОЁМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётных единицы 108 академических часов. Является дисциплиной части, формируемой участниками образовательных отношений, профессионального блока дисциплин, модуль фундаментальной физики, изучается в 10 семестре и завершается *зачетом*. Учебным планом предусмотрено проведение, лекций – 34 часов лабораторных работ - 36 часов, а также выделены часы на самостоятельную работу студента - 38 часов.

## III. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Форма обучения – очная

№	Наименование раздела дисциплины	Семестр	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося						Формы промежуточной аттестации
			Лек	Лаб	Пр	ОК	СР	Контроль	
1	Раздел I. Основы разработки наукоемкого программного обеспечения	10	17	18	-	-	19	-	
2	Раздел II Новые методы моделирования структур и материалов	10	17	18	-	-	19	-	
	Итого:		34	36	-	-	38	-	Зачет

#### **IV. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА**

**Раздел I. Основы разработки наукоемкого программного обеспечения** Методологические основы формализации процесса функционирования системы. Последовательность разработки и машинной реализации модели. Особенности перехода от описания системы к ее модели. Построение концептуальной, математической модели.

##### **Тема 1. Введение в методы моделирования**

Определение понятий моделирование, математическое моделирование, компьютерное моделирование. Основные принципы построения математических моделей. Обзор методов моделирования структур и материалов.

**Раздел II Новые методы моделирования структур и материалов** Особенности сбора данных машинного моделирования. Статистическая обработка данных моделирования. Оценка вероятности события, математического ожидания, дисперсии, закона распределения случайной величины, характеристик случайных векторов и функций.

##### **Тема 2. Моделирование наноматериалов**

Определение понятия наноматериалы. Особенности структуры наноматериалов. Методы моделирования наноматериалов.

##### **Тема 3. Моделирование наночастиц**

Построение модели наночастицы. Анализ основных характеристик наночастицы. Исследование влияния различных параметров на свойства наночастицы

#### **V. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА**

**Лабораторная работа 1. Язык программирования Python, продвинутое**

## **возможности и функционал**

Методологические основы формализации процесса функционирования системы. Последовательность разработки и машинной реализации модели. Особенности перехода от описания системы к её модели. Построение концептуальной, математической модели.

## **Лабораторная работа 2 Библиотека TensorFlow. Сверточные нейронные сети**

Особенности сбора данных машинного моделирования. Статистическая обработка данных моделирования. Оценка вероятности события, математического ожидания, дисперсии, закона распределения случайной величины, характеристик случайных векторов и функций.

## **Лабораторная работа 3 Библиотеки Keras и PyTorch.**

Keras, TensorFlow и PyTorch входят в тройку наиболее используемых DL фреймворков. Эти библиотеки используют и как продвинутые дата-инженеры, так и новички в области глубокого обучения. Чтобы облегчить Вам выбор библиотеки, здесь приведем сравнение между тройцей Keras, TensorFlow и PyTorch. Keras — это открытая библиотека для построения нейронных сетей. Написана на Python. Идеологически построена для быстрого прототипирования глубоких нейронных сетей. Tensorflow — также библиотека с открытым исходным кодом, но благодаря более низкоуровневому доступу позволяет создавать нейронные сети практически любой архитектуры. Pytorch — основное отличие заключается в том, что разработана была в Facebook AI, поэтому имеет несколько другой интерфейс. Однако многим разработчикам нравится именно библиотека, хоть она и слабее распространена

## **Лабораторная работа 4 Суперкомпьютерные вычисления в материаловедении**

Рассматривается подход, позволяющий выявить, для каких задач нужны суперкомпьютеры экзафлопсного класса. Возможности подхода рассмотрены на примерах актуальных задач материаловедения, физики конденсированного вещества и плотной плазмы, для решения которых необходимо атомистическое моделирование на современных и создаваемых в настоящее время суперкомпьютерах. Для каждой задачи проведено соответствие между набором изучаемых явлений и требуемым уровнем быстродействия (числа ядер) вычислительной системы. Показана масштабируемость параллельных программ моделирования и перспектива расширения предсказательной способности методов по мере увеличения числа вычислительных ядер и/или использования специализированных архитектур (графические ускорители). Рассмотрена иерархия методов моделирования, необходимых для адекватного

описания свойств веществ на различных пространственных и временных масштабах. На наиболее глубоком нанометровом/пикометровом масштабе для моделирования электронной динамики и построения эффективных потенциалов взаимодействия частиц применяется теория функционала плотности (квантовая молекулярная динамика). Классический метод молекулярной динамики позволяет явно рассмотреть системы движущихся атомов вплоть до микромасштабов. Выход на макромасштабы осуществляется с помощью кинетических подходов и механики сплошных сред.

## VI. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Код и наименование индикатора достижения	Результаты обучения	Оценочные средства *	
				текущий контроль	Промежуточная аттестация
1	Раздел I. Основы разработки наукоемкого программного обеспечения	<b>ПК-9.1</b> Организация и осуществление научно-исследовательской деятельности в области физики, направленной на развитие междисциплинарных и прикладных исследований	Знает теоретические основы фундаментальной физики, экспериментальное и математическое обоснование теорий и моделей физики; Знает нормы и правила при работе со спектральным оборудованием  Умеет получать фундаментальные научные результаты, опираясь на собственную логику развития науки; Умеет проводить расчетные исследования на сертифицированных кодах в рамках поставленной задачи, оценивать погрешность результатов измерений	УО-1 ПР-1 ПР-6	

			<p>Владеет навыками проведения фундаментальных и поисковых научных исследований в интересах обороны страны и безопасности государства;</p> <p>Владеет навыками проведения экспериментальных измерений на установках и стендах, сопоставления расчетных и экспериментальных данных</p>		
2	<p>Раздел II Новые методы моделирования структур и материалов</p>	<p><b>ПК-9.1</b>          Организация и осуществление научно-исследовательской деятельности в области физики, направленной на развитие междисциплинарных и прикладных исследований</p>	<p>Знает теоретические основы фундаментальной физики, экспериментальное и математическое обоснование теорий и моделей физики;</p> <p>Знает нормы и правила при работе со спектральным оборудованием</p> <p>Умеет получать фундаментальные научные результаты, опираясь на собственную логику развития науки;</p>	<p>ПР-1          ПР-6</p>	

			<p>Умеет проводить расчетные исследования на сертифицированных кодах в рамках поставленной задачи, оценивать погрешность результатов измерений</p> <p>Владеет навыками проведения фундаментальных и поисковых научных исследований в интересах обороны страны и безопасности государства;</p> <p>Владеет навыками проведения экспериментальных измерений на установках и стендах, сопоставления расчетных и экспериментальных данных</p>		
	Зачет	ПК-9.1			УО-1

## **VII. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ**

Самостоятельная работа определяется как индивидуальная или коллективная учебная деятельность, осуществляемая без непосредственного руководства педагога, но по его заданиям и под его контролем. Самостоятельная работа – это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления студента, его умственных и практических

операций и действий зависит и определяется самим студентом.

Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровней, что в итоге приводит к развитию навыка самостоятельного планирования и реализации деятельности.

Целью самостоятельной работы студентов является овладение необходимыми компетенциями по своему направлению подготовки, опытом творческой и исследовательской деятельности.

Формы самостоятельной работы студентов:

- работа с основной и дополнительной литературой, интернет-ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- подготовка реферативных обзоров источников периодической печати, опорных конспектов, заранее определенных преподавателем;
- поиск информации по теме с последующим ее представлением в аудитории в форме доклада, презентаций;
- подготовка к выполнению аудиторных контрольных работ;
- выполнение домашних контрольных работ;
- выполнение тестовых заданий, решение задач;
- составление кроссвордов, схем;
- подготовка сообщений к выступлению на семинаре, конференции;
- заполнение рабочей тетради;
- написание эссе, курсовой работы;
- подготовка к деловым и ролевым играм;
- составление резюме;
- подготовка к зачетам и экзаменам;

другие виды деятельности, организуемые и осуществляемые образовательным учреждением и органами студенческого самоуправления.

## **VIII. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Основная литература**

*(печатные и электронные издания)*

1. Елизаров, И.А. Моделирование систем : учебное пособие для вузов / И.А. Елизаров, Ю.Ф. Мартемьянов, А.Г. Схиртладзе [и др.]. – Старый Оскол : ТНТ, 2015. – 135 с. ПОК НБ ДВФУ: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=chamo:813814&theme=FEFU>
2. Афонин, В.В. Моделирование систем [Электронный ресурс]/ Афонин В.В., Федосин С.А. – М.: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), 2016. – 269 с. <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-89448&theme=FEFU>
3. Акамсина, Н. В. Моделирование систем : учебное пособие / Н. В. Акамсина, А. В. Лемешкин, Ю. С. Сербулов. — Воронеж : Воронежский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2016. — 67 с. — ISBN 978-5-89040-581-4. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-59118&theme=FEFU>

### **Дополнительная литература**

*(печатные и электронные издания)*

1. Ивин, В.В. Структурный анализ и проектирование информационных систем : учебное пособие / В.В. Ивин ; Дальневосточный федеральный университет, Школа экономики и менеджмента. – Владивосток : Изд-во Дальневосточного федерального университета, 2013. – 182 с. <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=chamo:717543&theme=FEFU>
2. Советов, Б. Я. Моделирование систем : учебник для академического бакалавриата / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. — 7-е изд. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 343 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-3916-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=Urait:Urait-425228&theme=FEFU>
3. Технология программирования : учебное пособие / Ю. Ю. Громов, О. Г. Иванова, М. П. Беляев, Ю. В. Минин. — Тамбов : Тамбовский государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2013. — 173 с. — ISBN

978-5-8265-1207-4. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://lib.dvfu.ru/lib/item?id=IPRbooks:IPRbooks-63910&theme=FEFU>

### **Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

1. <http://e.lanbook.com/>
2. <http://www.studentlibrary.ru/>
3. <http://znanium.com/>
4. <http://www.nelbook.ru/>

## **IX. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

Успешное освоение дисциплины предполагает активную работу студентов на всех занятиях аудиторной формы: лекциях и практиках, выполнении аттестационных мероприятий. В процессе изучения дисциплины студенту необходимо ориентироваться на проработку лекционного материала, подготовку к практическим занятиям, выполнение контрольных и творческих работ.

Освоение дисциплины предполагает рейтинговую систему оценки знаний студентов и предусматривает со стороны преподавателя текущий контроль за посещением студентами лекций, подготовкой и выполнением всех практических заданий, выполнением всех видов самостоятельной работы.

Промежуточной аттестацией по дисциплине является *зачет*.

Студент считается аттестованным по дисциплине при условии выполнения всех видов текущего контроля и самостоятельной работы, предусмотренных учебной программой.

Шкала оценивания сформированности образовательных результатов по дисциплине представлена в фонде оценочных средств (ФОС).

## **X. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться в следующих помещениях, оснащенных соответствующим оборудованием и программным

обеспечением, расположенных по адресу 690022, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10:

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
Учебные аудитории для проведения учебных занятий:	
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10, этаж 4, 75,75 кв.м., № помещения 2249	Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий. Компьютерный класс (L450) 20 компьютеров (системный блок модель - 30AGCT01WW P3+монитором АОС 28» L12868POU).
Помещения для самостоятельной работы:	
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10, этаж 10, 1016,2 кв.м., № помещения 477	Аудитории для самостоятельной работы студентов. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ДВФУ. Комплекты учебной мебели (столы и стулья). Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 115 шт. Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox. Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C). Полноцветный копир-принтер-сканер Xerox WorkCentre 7530 (WC7530CPS). Скорость доступа в Интернет 500 Мбит/сек. Рабочие места для людей с ограниченными возможностями здоровья оснащены дисплеями и принтерами Брайля (A1007 (A1042))

Для проведения учебных занятий по дисциплине, а также для организации самостоятельной работы студентам доступно следующее лабораторное оборудование и специализированные кабинеты, соответствующие действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-производственных работ.

В целях обеспечения специальных условий обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ДВФУ все здания оборудованы пандусами, лифтами, подъемниками, специализированными местами, оснащенными туалетными комнатами, табличками информационно-навигационной поддержки.