

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 19.12.2024 15:35:25
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
« ____ » _____ 2024 г.

Рабочая программа дисциплины
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

Направление подготовки
16.03.01 Техническая физика
Направленность программы бакалавриата
Цифровая физика материалов

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **инженерно-технологический**
Кафедра **мехатронных технологических комплексов**

Санкт-Петербург
2024

Б1.В.07

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины.....	5
4. Содержание дисциплины.....	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	7
4.2. Занятия семинарского типа.....	8
4.3. Лабораторные занятия.....	8
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	12
10.1. Информационные технологии.....	12
10.2. Программное обеспечение.....	12
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	12
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	13
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	13
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	15

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Для освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-3 Способен строить адекватные физические и математические модели материалов и изделий, с учетом результатов моделирования правильно выбирать методы и технологические приёмы изготовления, обработки и модифицирования материалов и изделий с целью придания им нужных свойств	ПК-3.4 Способен строить адекватные физические и математические модели материалов и изделий.	Знать: математические модели, описывающие взаимосвязь между составом, структурой и свойствами материалов, а также параметры процессов их получения (ЗН-1) Уметь: выполнять математическое и физико-химическое моделирование и прогнозирование свойств и характеристик материалов в зависимости от их состава, структуры и параметров процессов синтеза (У-1) Владеть: Современными методами расчета характеристик материалов на основе математических моделей, описывающих взаимосвязь между их составом, структурой и свойствами (Н-1).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.07), и изучается на 3 курсе в 5 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Материаловедение», «Математика», «Физика», «Общая и неорганическая химия», «Планирование исследований и анализ экспериментальных данных». Полученные в процессе изучения дисциплины «Вычислительное материаловедение» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Физика металлов», «Основы наноматериалов и нанотехнологий», «Физические методы исследования», «Спектроскопические методы исследования и контроля качества материалов», прохождении технологической и преддипломной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/144
Контактная работа с преподавателем:	74
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	-
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	36(2)
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	2
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	34
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен (36)

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/ п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Введение. Общие задачи вычислительного материаловедения при анализе взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов. Общие подходы и уравнения, применяемые при решении задач вычислительного материаловедения.	8		6	6	ПК-3
2	Аппроксимация экспериментальных данных, согласованность, устойчивость, сходимость	6		6	6	ПК-3
3	Основы метода конечных разностей. Конечно-разностная аппроксимация граничных условий.	8		4	8	ПК-3
4	Моделирование характеристик поверхности и межфазных взаимодействий	6		10	6	ПК-3
5	Фрактальные структуры. Фрактальные характеристики, методы их расчета и применение для моделирования свойств материалов.	8		10	8	ПК-3
	ИТОГО	36		36	34	

4.2 Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Общие принципы исследования взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов. Уравнения и модели, описывающие физические свойства (физико-механические электрические, магнитные, теплофизические) различных классов современных материалов	8	ЛВ
2	Методы аппроксимации экспериментальных данных. Анализ корреляций между параметрами. Поиск наилучших аппроксимирующих функций. Конечно-разностная аппроксимация уравнений в частных производных. Погрешность аппроксимации. Согласованность разностных схем. Устойчивость разностных схем: принцип максимума, спектральный метод Неймана. Примеры анализа устойчивости. Примеры применения корреляционного анализа и аппроксимации при решении задач материаловедения	6	ЛВ
3	Основы метода конечных разностей. Способы построения конечно-разностных аппроксимаций первой и второй производных первого и второго порядка точности, на равномерной и неравномерной сетке. Разложение функции в ряд Тейлора, интерполяция функции полиномами. Метод контрольного объема. Примеры применения метода контрольного объема к внутренним и граничным узлам сетки, в декартовых и цилиндрических координатах. Конечно-разностная аппроксимация граничных условий 1-го, 2-го и 3-го рода. Проблемы аппроксимации начальных условий для трехслойных схем.	8	Л
4	Особые характеристики поверхностного слоя материалов и межфазных границ. Принципы учета межфазных взаимодействий при анализе взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов. Модели межфазных взаимодействий с учетом особенностей функционального состава поверхности.	6	Л
5	Принцип фрактальности – общие определения, примеры регулярных фракталов. Статистические фракталы – особенности, примеры в материаловедении. Фрактальные характеристики микроструктуры материалов - фрактальная размерность, лакуарность, масштабная инвариантность, методы их расчета и влияние на свойства материалов.	8	ЛВ

4.2. Занятия семинарского типа.

Учебным планом не предусмотрены.

4.3 Лабораторные занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Приме- чание
		Всего	в том числе на практи- ческую подготовку	
1	Расчет характеристик полупроводниковых материалов на основе анализа температурной зависимости их электропроводности Обучающиеся анализируют зависимость электрического сопротивления и электропроводности серии образцов полупроводников, рассчитывают и сопоставляют энергии активации их собственной и примесной проводимости.	6	2	
2	Анализ корреляций и аппроксимация экспериментальных данных. Обучающиеся рассчитывают коэффициенты корреляции между составом (содержанием определенных компонентов) и целевыми свойствами исследуемых материалов, определяют функции, наилучшим образом описывающие наблюдаемые зависимости.	6		МГ
3	Конечно-разностная аппроксимация граничных условий. Аппроксимация граничных условий 1-го, 2-го и 3-го рода и 3-го рода.	4		МГ
4	Изучение влияния межфазных взаимодействий на свойства композиционного материала Обучающиеся синтезируют серию композиционных материалов на полимерной основе при варьировании условий предварительной обработки (термической, химической) поверхности наполнителя, определяют содержание различных функциональных групп на поверхности наполнителя и анализируют зависимости между функциональным составом поверхности наполнителя и целевыми свойствами композиты	10		МГ
5	Изучение влияния фрактальной структуры композитов на их свойства. Обучающиеся анализируют электронные	10		МГ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Приме- чание
		Всего	в том числе на практи- ческую подготовку	
	микрофотографии серии композиционных материалов на полимерной основе с различным содержанием наполнителя и/или условиями его подготовки, выполняют расчет фрактальных характеристик микроструктуры композита (фрактальной размерности, лакуарности, масштабной инвариантности), сопоставляют и анализируют полученные результаты с целевыми свойствами материала.			

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Методы определения типа уравнений при числе независимых переменных более двух.	6	Устный опрос
2	Интегро-интерполяционный метод.	6	Устный опрос
3	Сходимость решения нестационарных задач.	8	Устный опрос
4	Программное обеспечение для моделирования межфазных взаимодействий.	6	Устный опрос
5	Программное обеспечение для расчета и анализа фрактальных структур.	8	Устный опрос

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <https://media.spbti.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Текущая аттестация по дисциплине проводится в форме сдачи отчетов по лабораторным работам.

Итоговый контроль проводится в форме экзамена. К сдаче экзамена допускаются обучающиеся, выполнившие все формы текущего контроля.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций. При сдаче зачета, студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

Вариант № 1
1. Методы аппроксимации экспериментальных данных. Поиск наилучших аппроксимирующих функций.
2. Отличия поверхностного слоя материалов от объемных слоев. Функциональные группы и их учет при анализе межфазных взаимодействий.
3. Фрактальные характеристики микроструктуры материалов - фрактальная размерность, лакунарность, масштабная инвариантность, методы их расчета и влияние на свойства материалов.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) Печатные издания:

1. Лабораторный практикум «Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов»: учебное пособие / М.М.Сычев, В.Н.Коробко, В.В.Бахметьев [и др.], Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. – 161 с.

2. Мякин, С.В. Методы статистической обработки экспериментальных данных: учебное пособие / С.В. Мякин, В.В. Бахметьев; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2022. – 26 с.

3. Характеристики проводников и полупроводников: учебное пособие / С.В. Мякин, К.А. Огурцов, Т.В. Лукашова, М.М.Сычев; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2022. – 30 с.

4. Петров, А.А. Корреляционный спектральный анализ веществ : учебное пособие. Кн. 2 : Анализ конденсированной фазы / А. А. Петров, Е.А. Пушкарева. – Санкт-Петербург: Химия, 1993 – 344 с. – ISBN 5-7245-0806-0.

5. Советов, Б. Я. Моделирование систем. Практикум : учебное пособие для бакалавров: учебное пособие для вузов по направлениям "Информатика и вычислительная техника" и "Информационные системы" / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев ; Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет. 4-е изд., перераб. и доп. - Москва : Юрайт, 2012. – 295 с.

5. Киреев, В. И. Численные методы в примерах и задачах: Учебное пособие для втузов / В.И. Киреев, А.В. Пантелеев; Москва: Высшая школа, 2008. - 480 с.

6. Срочко, В. А. Численные методы. Курс лекций : Учебное пособие для вузов по спец. 010200 "Прикладная математика и информатика" и по направлению 510200 "Прикладная математика и информатика" / В. А. Срочко. Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2010. - 202 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 20.11.2024). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

б) электронные издания

1. Лабораторный практикум «Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов»: учебное пособие / М.М.Сычев, В.Н.Коробко, В.В.Бахметьев [и др.], Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. – 161 с.

2. Мякин, С.В. Исследование спектров пропускания, поглощения, зеркального и диффузного отражения: практикум / С.В.Мякин, М.М.Сычев // Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2015. – 34 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 20.11.2024). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

3. Лабораторный практикум «Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов»: учебное пособие / М.М.Сычев, В.Н.Коробко, В.В.Бахметьев [и др.], Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра теоретических основ материаловедения. – Санкт-Петербург : СПбГТИ(ТУ), 2013. – 161 с. // СПбГТИ. Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 20.11.2024). - Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

- учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <https://media.spbti.ru>

- **Электронная библиотека СПбГТИ(ТУ) (на базе ЭБС «БиблиоТех»)**

Принадлежность – собственная СПбГТИ(ТУ).

Договор на передачу права (простой неисключительной лицензии) на использования результата интеллектуальной деятельности ООО «БиблиоТех»

ГК№0372100046511000114_135922 от 30.08.2011

Адрес сайта – <http://bibl.tti-gti.ru/>

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.yandex.ru, www.google.ru, www.rambler.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:

www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином», «НОТ»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

www.consultant.ru - КонсультантПлюс - база законодательных документов по РФ и Санкт-Петербургу;

www.scopus.com - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> -

Издательство IOP (Великобритания);

www.oxfordjournals.org - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;
<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Вычислительное материаловедение» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:
плановость в организации учебной работы;
серьезное отношение к изучению материала;
постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Для проведения занятий имеются персональные компьютеры с программным обеспечением:

- Операционная система Microsoft Windows 10 Professional;

Microsoft Office Std, Академическая лицензия, сублицензионный договор №02(03)15 от 20.01.2015, с 20.01.2015 бессрочно;

- Антивирусное программное обеспечение Kaspersky Endpoint Security;

- Apache OpenOffice.org (Apache 2.0) / LibreOffice (GNU LGPL 3+, MPL2.0);

- PTC Mathcad (ГК №19 от 13.10.08 г. на предоставление академической лицензии на MathCAD University Department Perpetual-200 Floating).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

1. <http://prometeus.nse.ru> – база ГПНТБ СО РАН.

2. <http://borovic.ru> - база патентов России.

3. <http://1.fips.ru/wps/portal/Register> - Федеральный институт промышленной собственности

4. <http://google.com/patent>- база патентов США.

5. <http://freepatentsonline.com>- база патентов США.

6. <http://patentmatie.com/welcome> - база патентов США.

7. http://patika.ru/Epasenet_patentnie_poisk.html - европейская база патентов.

8. <http://gost-load.ru>- база ГОСТов.
9. <http://worlddofaut.ru/index.php> - база ГОСТов.
10. <http://elibrary.ru> – Российская поисковая система научных публикаций.
11. <http://springer.com> – англоязычная поисковая система научных публикаций.
12. <http://dissforall.com> – база диссертаций.
13. <http://diss.rsl.ru> – база диссертаций.
14. <http://webbook.nist.gov/chemistry> - NIST Standard Reference Database.
15. <http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html> - база спектров химических соединений.
16. <http://markmet.ru> – марочник сталей.
17. Справочники и базы данных по ИК-спектроскопии и рентгенофазовому анализу.

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Учебная аудитория для проведения лекционных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы – 15 шт.; стулья - 29 шт.;

маркерная доска, демонстрационный экран, проектор, компьютер.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.

Основное оборудование: столы – 16 шт.; стулья - 33 шт.;

маркерная доска, телевизор, компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» – 8 шт.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа (лабораторные).

Лаборатория оптико-механических измерений:

Основное оборудование: Микротвёрдомер ПМТ-3.

Ультразвуковой твёрдомер «Константа К5У».

Прибор для измерения шероховатости поверхности Mitutoyo SJ-201.

Прибор для измерения шероховатости поверхности на основе микроскопа МИС-11.

Лазерный дальномер CONDROL X2. Длинномер ИЗВ-6.

Микроскопы измерительные специальные (в т.ч. микрокатеры и оптикаторы) – 10 шт.

Коллекция токарных резцов и комплект угломеров для определения их геометрических характеристик

Коллекция инструментов для обработки отверстий: Свёрла спиральные, центровые, кольцевые. Зенкеры цилиндрические, конические. Развёртки цилиндрические, конические, машинные ручные. Метчики.

Коллекция фрез: Концевые, шпоночные, осевые, фасонные, модульные, фрезерные головки.

Коллекция сварных соединений, полученных различными методами: ручная дуговая сварка, электроконтактная (стыковая, точечная, роликовая), электронным лучом, наплавка), дефекты сварных швов.

Комплект оснастки для изготовления песчаной формы. Формы для литья по выплавляемым моделям. Кокили для литья в металлические формы.

Штангенинструменты (механические и электронные штангенциркули, штангенглубиномеры, штангенрейсмасы). Микрометрические инструменты (микрометры, глубиномеры, нутромеры). Калибры-скобы и калибры-пробки для контроля размеров деталей.

FDM 3D-принтер Artillery Genius.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа (лабораторные).

Лаборатория химических и термических исследований:

Основное оборудование: Набор химической посуды и реактивов. рН-метр. Образцы материалов для проведения испытаний на коррозионную стойкость. Вытяжной шкаф. Электропечи камерные СНОЛ 3/11 – 2 шт. Сушильный шкаф ШС-80-01 СПУ. Весы аналитические электронные ВЛР 200. Закалочная ванна. Сварочный аппарат Ресанта САИ 250. DLP 3D-принтер ANYCUBIC PHOTON 4. Воронка Холла. Шаровая мельница. Виброприводом

Лаборатория спектральных измерений:

Основное оборудование: Спектрофлюориметр AvaSpec 3648. Исследовательский радиометр IL 1700. Спектрофотометр СФ-46. Спектроколориметр ТКА-ВД. Яркометр ФПЧ-УХЛ4. RLC метр E7-20. Вольтметр универсальный электрометрический В7Э-42. Комплекс измерительный K505. Источник калиброванных напряжений. Электрометр Keithley. Генератор сигналов низкочастотный ГЗ-123. Мегомметр ПС-1. Источник питания постоянного тока Б5-44.

Лаборатории Инжинирингового центра СПбГТИ(ТУ):

Рентгеновский дифрактометр RigakuSmartLab 3.

Спектрометр ЯМР Bruker AVANCE III HD 400 NanoBay;

Помещение для самостоятельной работы.

Основное оборудование: столы – 54 шт.; стулья - 54 шт.;

маркерная доска, проектор, демонстрационный экран;

компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» – 24 шт.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
«Вычислительное материаловедение»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-3	Способен строить адекватные физические и математические модели материалов и изделий, с учетом результатов моделирования правильно выбирать методы и технологические приёмы изготовления, обработки и модифицирования материалов и изделий с целью придания им нужных свойств	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	УРОВНИ СФОРМИРОВАННОСТИ (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-3.4 Способен строить адекватные физические и математические модели материалов и изделий.	Знает: математические модели, описывающие взаимосвязь между составом, структурой и свойствами материалов, а также параметры процессов их получения (ЗН-1)	Ответы на вопросы № 1-6, 18-23 к экзамену.	Имеет представление о важнейших уравнениях и зависимостях, описывающих взаимосвязь между составом, структурой и свойствами материалов,	Знает основные принципы и методы моделирования взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов	Способен анализировать взаимосвязь между составом, структурой и свойствами материалов с использованием математических моделей
	Умеет выполнять математическое и физико-химическое моделирование и прогнозирование свойств и характеристик материалов в зависимости от их состава, структуры и параметров процессов синтеза (У-1)	Ответы на вопросы №7-17 к экзамену. Отчеты о выполнении лабораторных работ	Имеет представление о методах анализа свойств и характеристик материалов на основе данных математического и физико-химического моделирования	Знает методы и принципы прогнозирования свойств и характеристик материалов на основе результатов моделирования	Способен применять на практике методы математического и физико-химического моделирования для сравнительного анализа и прогнозирования свойств и характеристик материалов
	Владеет современными методами расчета характеристик материалов на основе математических моделей, описывающих взаимосвязь между их составом, структурой и свойствами (Н-1).	Ответы на вопросы №1-6, 19-24 к экзамену. Отчеты о выполнении лабораторных работ	Имеет представление о методах расчета характеристик материалов на основе математических моделей	Способен применять методы расчета характеристик материалов при решении типовых учебных задач	Способен проводить сравнительный анализ характеристик материалов на основе результатов моделирования

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации **Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3**

1. Уравнения и модели, описывающие электрические свойства проводников.
2. Уравнения и модели, описывающие электрические свойства проводников.
3. Уравнения и модели, описывающие электрические свойства диэлектриков.
4. Уравнения и модели, описывающие магнитные свойства материалов.
5. Уравнения и модели, описывающие теплофизические свойства материалов.
6. Анализ корреляций между параметрами. Коэффициенты корреляции.
7. Методы аппроксимации экспериментальных данных. Поиск наилучших аппроксимирующих функций.
8. Конечно-разностная аппроксимация уравнений в частных производных.
9. Погрешность аппроксимации. Согласованность разностных схем.
10. Интегро-интерполяционный метод.
11. Устойчивость разностных схем: принцип максимума, спектральный метод Неймана. Примеры анализа устойчивости.
12. Методы определения типа уравнений при числе независимых переменных более двух.
13. Основы метода конечных разностей. Способы построения конечно-разностных аппроксимаций первой и второй производных первого и второго порядка точности, на равномерной и неравномерной сетке.
14. Разложение функции в ряд Тейлора, интерполяция функции полиномами.
15. Метод контрольного объема. Примеры применения метода контрольного объема к внутренним и граничным узлам сетки, в декартовых и цилиндрических координатах.
16. Конечно-разностная аппроксимация граничных условий 1-го, 2-го и 3-го рода. Проблемы аппроксимации начальных условий для трехслойных схем.
17. Аппроксимация граничных условий 1-го, 2-го и 3-го рода и 3-го рода.
18. Отличия поверхностного слоя материалов от объемных слоев. Функциональные группы и их учет при анализе межфазных взаимодействий.
19. Принципы учета межфазных взаимодействий при анализе взаимосвязи между составом, структурой и свойствами материалов.
20. Модели межфазных взаимодействий с учетом особенностей функционального состава поверхности.
21. Принцип фрактальности – общие определения, примеры регулярных фракталов.
22. Статистические фракталы – особенности, примеры в материаловедении.
23. Фрактальные характеристики микроструктуры материалов - фрактальная размерность, лакуарность, масштабная инвариантность, методы их расчета и влияние на свойства материалов.
24. Программное обеспечение для расчета и анализа фрактальных структур.

При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше.
Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

4 Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

Шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»). При этом «удовлетворительно» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.