

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР
А.А.Панфилов

« 7 » *апреля* 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

(наименование дисциплины)

Направление подготовки 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

Профиль/программа подготовки

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачет)
3	5 / 180	18	-	36	90	Экзамен (36 ч.)
Итого	5 / 180	18	-	36	90	Экзамен (36 ч.)

Владимир 201 5

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Информационные технологии» является формирование у студентов навыков проведения научных исследований с использованием компьютерных средств.

Задачи дисциплины:

- изучение основных современных способов моделирования микро- и нанообъектов, основанных на использовании эмпирических силовых полей;
- освоение программных средств и методов компьютерной реализации разработанных моделей.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Данная дисциплина относится к базовой части основной профессиональной образовательной программы.

Изучение дисциплины предполагает наличие у студентов знания, умения и компетенции, полученные обучающимися в средней образовательной школе, а так же в первый год обучения в вузе дисциплин естественнонаучного блока: математики, физики, химии, а так же дисциплин информационного блока: информатика, компьютерное сопровождение научных исследований.

Дисциплина обеспечивает последующее изучение дисциплин: вычислительная физика, методы математического моделирования, моделирование и проектирование микро- и наносистем. Знания, полученные в рамках изучения данной дисциплины, могут быть применены для написания выпускной квалификационной работы.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате изучения дисциплины обучающийся должен освоить следующую компетенцию:

- способностью представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики (ОПК-1);
- способностью выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2);

- готовностью применять современные средства выполнения и редактирования изображений и чертежей и подготовки конструкторско-технологической документации (ОПК-4);

- способностью осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий (ОПК-6);

- способностью учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности (ОПК-7);

- способностью использовать навыки работы с компьютером, владеть методами информационных технологий, соблюдать основные требования информационной безопасности (ОПК-9).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

Знать: технологию работы на ПК в современных операционных средах, основные методы разработки алгоритмов и программ, структуры данных, используемые для представления типовых информационных объектов, типовые алгоритмы обработки данных (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-4, ОПК-6); информационные, компьютерные и сетевые технологии (ОПК-6); современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности (ОПК-7); основные требования информационной безопасности (ОПК-9);

Уметь: применять программное обеспечение для решения типовых задач синтеза и анализа материалов и компонентов наносистемной техники; выявлять естественнонаучную сущность проблем (ОПК-2); представлять научную картину мира (ОПК-1); привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2); использовать современные средства выполнения и редактирования изображений и чертежей (ОПК-4); осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных (ОПК-6); учитывать современные тенденции развития электроники (ОПК-7); использовать навыки работы с компьютером (ОПК-9);

Владеть: способностью представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира (ОПК-1); способностью выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности (ОПК-2); современными средствами выполнения и редактирования изображений и чертежей и подготовки конструкторско-технологической документации (ОПК-4); способностью осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных

и сетевых технологий (ОПК-6); способностью учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности (ОПК-7); методами информационных технологий, соблюдать основные требования информационной безопасности (ОПК-9).

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часов.

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Объем учебной работы, с применением интерактивных методов (в часах / %)	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра), форма промежуточной аттестации (по семестрам)	
				Лекции	Семинары	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	СРС			КП / КР
1	Основы работы с MATLAB.	3	1-2	2			4		10		3/50	
2	Решение типовых задач алгебры и анализа средствами MATLAB.	3	3-6	4			8		20		6/50	рейтинг-контроль №1
3	Optimization toolbox в MATLAB.	3	7-8	2			4		10		3/50	
4	Моделирование атомно-молекулярных структур.	3	9	2			4		10		2/33	рейтинг-контроль №2
5	Методы моделирования многоатомных систем.	3	10-13	4			8		10		5/41	
6	Учет влияния внешней среды.	3	14-15	2			4		10		3/50	
7	Знакомство с программами, реализующими эмпирические расчеты молекулярных систем на примере Avogadro и GROMACS	3	16-18	2			4		20		3/50	рейтинг-контроль №3
Всего		2	18	18			36		90		25/46	Экзамен 36 ч

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ БАЗОВОГО ОБЯЗАТЕЛЬНОГО МОДУЛЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Тема № 1. Основы работы с MATLAB.
Вещественные числа и типы данных double. Числовые массивы. Вычисления с массивами. Построение графиков функций. Сценарии и m-файлы.
Тема № 2. Решение типовых задач алгебры и анализа средствами MATLAB
Нахождение нулей функции. Поиск минимума функции. Вычисление определенных интегралов. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Символьные вычисления.
Тема № 3. Optimization toolbox в MATLAB.
Optimization toolbox в MATLAB.
Тема № 4. Моделирование атомно-молекулярных структур.
Моделирование атомно-молекулярных структур. Общая характеристика программ и методов. Основные направления.
Тема № 5. Методы моделирования многоатомных систем.
Методы моделирования многоатомных систем, основанные на использовании эмпирических силовых полей. Методы минимизации энергии. Метод Монте-Карло. Метод молекулярной динамики.
Тема № 6. Учет влияния внешней среды.
Учет влияния внешней среды. Термостаты и баростаты.
Тема № 7. Знакомство с программами, реализующими эмпирические расчеты молекулярных систем на примере Avogadro и GROMACS
Знакомство с программами, реализующими эмпирические расчеты молекулярных систем на примере Avogadro и GROMACS

Темы лабораторных работ:

Лабораторная работа №1	Основы работы в MATLAB
Лабораторная работа №2	Решение типовых задач алгебры и анализа
Лабораторная работа №3	Решение задачи оптимизации
Лабораторная работа №4	Поиск равновесных состояний полимеров методами молекулярной механики. Минимизация энергии в программном пакете Avogadro.
Лабораторная работа №5	Изучение нано- и биологических процессов методами молекулярной динамики с использованием пакета GROMACS

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины используются:

- лекционно-семинарская система обучения (традиционные лекционные и лабораторные занятия);
- case-study (получение на лабораторных работах учебных кейсов с постановкой задачи и глубокой проработкой проблемы разработки интеллектуальной системы);
- обучение в малых группах (выполнение лабораторных работ в группах из двух или трёх человек);
- применение мультимедиа технологий (проведение лекционных занятий с применением компьютерных презентаций и демонстрационных роликов с помощью проектора или ЭВМ).

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

а) Вопросы рейтинг-контроля:

Рейтинг-контроль №1

1. Основы работы в системе MATLAB. Работа с массивами. Построение графиков функций. Средства программирования.
2. Решение типовых задач алгебры и анализа. Нахождение нулей функций. Вычисление определенных интегралов.
3. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Символьные вычисления.
4. Средства оптимизации в MATLAB.

Рейтинг-контроль №2

1. Моделирование атомно-молекулярных структур. Общая характеристика программ и методов.
2. Особенности эмпирических расчетов. Достоинства и недостатки методов.
3. Методы минимизации энергии в эмпирических расчетах молекулярной механики.
4. Методы Монте-Карло в эмпирических расчетах молекулярной механики.

Рейтинг-контроль №3

1. Эмпирический метод молекулярной динамики.
2. Термостат Берендсена.
3. Термостат Нозе-Гувера.
4. Броуновская динамика.
5. Программный пакет Avogadro. Возможности пакета.

6. Программный пакет GROMACS. Возможности пакета. Сопутствующее программное обеспечение

б) Вопросы к экзамену по дисциплине:

1. Основы работы в системе MATLAB. Работа с массивами. Построение графиков функций. Средства программирования.
2. Решение типовых задач алгебры и анализа. Нахождение нулей функций. Вычисление определенных интегралов.
3. Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Символьные вычисления.
4. Средства оптимизации в MATLAB.
5. Моделирование атомно-молекулярных структур. Общая характеристика программ и методов.
6. Особенности эмпирических расчетов. Достоинства и недостатки методов.
7. Методы минимизации энергии в эмпирических расчетах молекулярной механики.
8. Методы Монте-Карло в эмпирических расчетах молекулярной механики.
9. Эмпирический метод молекулярной динамики.
10. Термостат Берендсена.
11. Термостат Нозе-Гувера.
12. Броуновская динамика.
13. Программный пакет Avogadro. Возможности пакета.
14. Программный пакет GROMACS. Возможности пакета. Сопутствующее программное обеспечение.

в) Задания для самостоятельной работе студентов:

1. Основы работы в Matlab

Задать две произвольные ненулевые матрицы A и B размером 3x3. Выполнить действия:

$$A \cdot B, A \cdot B^T$$

Найти определители полученных матриц.

2. Решение нелинейных алгебраических уравнений средствами Matlab

Решить методами деления пополам, итераций и Ньютона уравнения (по вариантам):

1. $x^2 + \ln x - 2 = 0$

2. $x^3 + \ln x = 0$

3. $e^x = \frac{1}{x}$

4. $\cos x - \sqrt{x} = 0$

5. $\tan x = (x - 1)^2$

6. $x^3 + 2.5x^2 + 2x + 5 = 0$

7. $\frac{x}{2} = \sqrt[3]{x+1}$

8. $e^x = e^{-x} - 1$

9. $\cos x = \ln x$

10. $e^x - 3\sqrt{x} = 0$

Алгоритм решения реализовать с точностью $\varepsilon = 10^{-6}$, используя язык программирования MATLAB (написать m-файл). Проверить решение, используя графические средства MATLAB (решить графически с помощью функции plot), а так же функцию fzero.

3. Моделирование физических процессов средствами Matlab на примере задачи механики

Из пушки ведется стрельба по цели. Скорость снаряда при вылете из ствола $V_0=1000$ м/с, его масса $m=2$ кг. Сила сопротивления воздуха движению снаряда пропорциональна квадрату скорости $F_c = kS\rho S^2$, где $k=0.2$ – коэффициент, зависящий от формы снаряда, $S=20$ см² – площадь его поперечного сечения, ρ – плотность воздуха, $g=9.81$ м/с² – ускорение свободного падения. Определить максимальную дальность стрельбы по горизонтально расположенной цели, время полета снаряда и его скорость при попадании в цель. Построить график траектории.

4. Основы молекулярного моделирования средствами пакета Avogadro

Построить средствами пакета Avogadro молекулы фуллерена. Декорировать поверхность молекулы атомом кислорода (ковалентно связанным с поверхностью). Оптимизировать полученную структуру. Добавить атом меди, связанный с атомами кислорода и углерода. Оптимизировать полученную структуру. Определить длины связей Cu-O, Cu-C и величину валентного угла C-O-Cu. Сформировать структурный файл в .xyz формате.

5. Применение метода молекулярной динамики для моделирования химических процессов. Программный пакет Gromacs.

Рассчитать скорость потери массы молекулы полипропилена при окислении в атмосфере, содержащей 75% азота и 25% кислорода, при температурах 300 К, 500 К, 700 К, 900 К. Давление постоянно и равно атмосферному.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература:

1. **Информационные технологии: разработка информационных моделей и систем:** Учеб. пос. / А.В.Затонский - М.: ИЦ РИОР: НИЦ ИНФРА-М, 2014 - 344с.: 60x88 1/16 + (Доп. мат. znanium.com) - (Высшее образование: Бакалавриат)(о) ISBN 978-5-369-01183-6, 500 экз.

2. **Информационные технологии и системы:** Учебное пособие / Е.Л. Федотова. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 352 с.: ил.; 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-8199-0376-6.

3. **Базовые и прикладные информационные технологии:** Учебник / В.А. Гвоздева. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 384 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-8199-0572-2, 500 экз.

б) дополнительная литература:

1. Трубочкина, Н.К. **Моделирование 3D наносхемотехники**[Электронный ресурс] / Н.К. Трубочкина.—2-е изд. (эл.). — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. - 526 с. — Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-9963-2633-4.

2. **Вычислительные методы. Теория и практика в среде MATLAB:** Курс лекций: Уч.пос. для вузов / К.Э. Плохотников. - 2-е изд., исправ. - М.: Гор. линия-Телеком, 2013. - 496 с.: ил.; 60x88 1/16. - (Уч.пос. для вузов). (о) ISBN 978-5-9912-0354-8, 500 экз.

3. **Теория вероятностей в пакете MATLAB** / Плохотников К.Э., Николенко В.Н. - М.:Гор. линия-Телеком, 2014. - 611 с.: ISBN 978-5-9912-7005-2.

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционные аудитории, оснащённые доской (для мела или маркера), экраном для проекционных систем, мультимедийным проектором и ноутбуком.

Аудитории для проведения лабораторных занятий, оснащённые современными персональными компьютерами, объединёнными в локальную вычислительную сеть и укомплектованными необходимым системным и прикладным программным обеспечением, аудитории вычислительного центра.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС
ВО по направлению 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

Рабочую программу составил доцент кафедры ФиПМ Малафеев С. С. СБ
(ФИО, подпись)

Рецензент
(представитель работодателя) Красов Д.С. Зее директор
ООО "РС Сервис"
(место работы, должность, ФИО, подпись)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ
Протокол № 11 от 02.04.15 года
Заведующий кафедрой Аракелян С.М.
(ФИО, подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника
Протокол № 11 от 02.04.15 года
Председатель комиссии Аракелян С.М.
(ФИО, подпись)

ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год
Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года
Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год
Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года
Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год
Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года
Заведующий кафедрой _____