

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 » января 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 2015

## 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

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

#### Темы лабораторных работ:

<b>Лабораторная работа №1</b>	Основы работы в MATLAB
<b>Лабораторная работа №2</b>	Решение типовых задач алгебры и анализа
<b>Лабораторная работа №3</b>	Решение задачи оптимизации
<b>Лабораторная работа №4</b>	Поиск равновесных состояний полимеров методами молекулярной механики. Минимизация энергии в программном пакете Avogadro.
<b>Лабораторная работа №5</b>	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,  $S=20$  см<sup>2</sup> – площадь его поперечного сечения,  $\rho$  – плотность воздуха,  $g=9.81$  м/с<sup>2</sup> – 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.

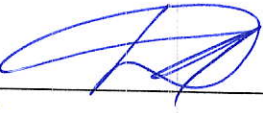
## **8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**


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

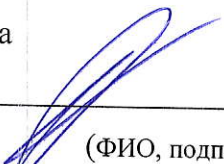
Аудитории для проведения лабораторных занятий, оснащённые современными персональными компьютерами, объединёнными в локальную вычислительную сеть и укомплектованными необходимым системным и прикладным программным обеспечением, аудитории вычислительного центра.

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.   
(ФИО, подпись)

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

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

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   
(ФИО, подпись) Аракелян С.М.

### 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 \_\_\_\_\_