

**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

« 07 » 04 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

(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 (экс./зачет)
4	3/108	18	-	36	54	Зачет
Итого	3/108	18	-	36	54	Зачет

Владимир 201 5

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Компьютерное моделирование» являются:

1. Получение представления об основных актуальных направлениях развития компьютерного моделирования в прикладных задачах.
2. Мотивация студентов к выбору собственного направления исследований при выполнении научной работы и подготовке выпускной квалификационной работы.
3. Развитие навыков представления результатов своей работы и участия в научной дискуссии.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Компьютерное моделирование» является дисциплиной по выбору вариативной части блока Б.1 ОПОП. Изучение дисциплины проходит в четвёртом семестре, так как она должна помочь магистранту ознакомиться с современными методами компьютерного моделирования, что может пригодиться ему при работе над выпускной квалификационной работой.

Для изучения дисциплины студенты должны обладать знаниями, умениями и навыками по разработке математических моделей и их программных реализаций, понимать базовые принципы моделирования, владеть современными языками программирования и математическими пакетами, обладать знаниями в области математического анализа, таких как дифференциальное, интегральное, матричное исчисления, теория вероятностей и математическая статистика, дискретная математика, вычислительная математика.

Освоение дисциплины необходимо для прохождения следующих практик учебного плана: «Преддипломная практика», выполнение выпускной квалификационной работы.

## 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате изучения дисциплины обучающийся должен освоить следующие компетенции:

способностью проводить физико-математическое моделирование исследуемых процессов нанотехнологии и объектов нано- и микросистемной техники с использованием современных компьютерных технологий (ПК-1).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

**Знать:** основные современные направления развития прикладной математики и информатики; математические методы моделирования (ПК-1).

**Уметь:** самостоятельно выполнять поиск литературных источников по новым для себя областям знаний, в том числе с использованием ресурсов сети Интернет и электронных библиотек, а также применять информацию из этих источников при решении задач прикладной математики и информатики; разрабатывать и анализировать концептуальные и теоретические модели решаемых научных

проблем и задач; анализировать концептуальные и теоретические модели решаемых задач проектной и производственно-технологической деятельности (ПК-1).

**Владеть:** методами разработки концептуальных и теоретических моделей разрабатываемых задач (ПК-1).

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 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	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	СРС	КП / КР		
1	Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты.	4	1-2	2	-	4	-	14	-	2/33%	рейтинг-контроль 1
2	Потенциалы взаимодействия. Методы моделирования частица-частица	4	3-5	8	-	16	-	15	-	10/41%	рейтинг-контроль 2
3	Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования	4	6-9	8	-	16	-	25	-	10/41%	рейтинг-контроль 3
Всего		4	9	18	-	36	-	54	-	22/40%	Зачет

#### СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

##### Темы лекций:

**Раздел 1.** Введение в нанотехнологии. Основные понятия, явления и эффекты.

**Лекция. 1.** Современные нанотехнологии, основные пути развития.

**Лекция. 2.** Размерные эффекты в материалах. Изменения базовых свойств вещества при достижении критических размеров.

**Раздел 2.** Потенциалы взаимодействия. Методы моделирования частица-частица

**Лекция. 3-5.** Молекулярно-динамические методы моделирования.

**Лекция. 6.** Непрерывные модели.

**Лекция. 7.** Дискретные модели.

**Лекция. 8-10.** Методы частиц.

**Раздел 3.** Моделирование из первых принципов. Квантово-механические методы моделирования

**Лекция. 11-13.** Псевдопотенциалы и их применение.

**Лекция. 14-15.** Методы динамического моделирования.

**Лекция. 16-17.** Гидродинамические модели и их применение

**Лекция. 18-20.** Квантовые модели

##### Темы лабораторных работ:

Лабораторная работа № 1 «Квантовая модель одноэлектронного атома»

Лабораторная работа № 2 «Многоэлектронные атомы»

Лабораторная работа № 3 «Потенциалы взаимодействия частиц»

Лабораторная работа № 4 «Моделирование систем методом молекулярной динамики»

Лабораторная работа № 5 «Моделирование процесса формирования нанокластеров»

## 5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Проведение лекционных занятий обеспечено специализированными аудиториями, оборудованными компьютерами и электронными проекторами, что позволяет сопровождать чтение лекций демонстрацией компьютерных слайдов.

В рамках лекционного курса используются также следующие технологии:

- Компьютерные симуляции различных математических моделей, лежащих в основе нанотехнологий.
- Технология проблемного обучения (case study). При рассмотрении вопросов практического применения рассмотренного теоретического материала, используется диалог со студентами на предмет возможных способов решения поставленной задачи.
- Встречи с учеными и специалистами, работающими в направлении развития и использования перспективных лазерных технологий.

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

**Текущий рейтинг- контроль** успеваемости является распределённым и основан на оценке нескольких составляющих.

1. Подготовка и защита реферата
2. Участие в обсуждении рефератов
3. Выполнение лабораторных работ

### *Темы рефератов для рейтинг-контроля 1*

1. Методы классификации наноматериалов.
2. Размерные эффекты в наноматериалах.
3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

### ***Темы рефератов для рейтинг-контроля 2***

1. Потенциалы парного взаимодействия
2. Ближнедействующие потенциалы
3. Дальнедействующие потенциалы
4. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов
5. Принципы и алгоритмы стеганографии.
6. Методы частиц
7. Сеточные модели
8. Гибридные модели (частицы+сетка)
9. Модели с разномасштабными явлениями
10. Стационарные и динамические задачи моделирования
11. Гидродинамические метода моделирования движения частиц

### ***Темы рефератов для рейтинг-контроля 3***

1. Квантовый метод Монте-Карло
2. Объемные методы Монте-Карло
3. Метод Хартри-Фока
4. Метод сильной связи
5. Полуэмпирические методы
6. Моделирование структуры материалов из первых принципов:
7. Моделирование структур кластеров из первых принципов
8. Теория функционала плотности

#### Участие в обсуждении рефератов.

Преподаватель фиксирует вопросы по существу, заданные слушателями докладчику. Вопрос должен относиться к теме доклада. Минимальное количество заданных студентом за семестр вопросов должно равняться количеству прозвучавших докладов за вычетом количества докладов, представленных им самим. Если данная норма не выполнена, студент не набирает определённое (объявленное в начале семестра) количество баллов рейтингового контроля, учитываемое при простановке оценки на экзамене.

#### Выполнение лабораторных работ

Выполнение лабораторных работ подразумевает под собой подготовку краткого доклада по теории и методам реализации конкретных математических моделей, подготовку отчета по лабораторной состоящего из: краткого описания математической модели, программной реализации, результатов моделирования и их анализа.

#### Задания к лабораторным работам:

##### ***К рейтинг-контролю 1***

1. Моделирования роста кластера из потока атомов с использованием модели частиц (диаметры 1-100нм);

##### ***К рейтинг-контролю 2***

1. Моделирование роста кластера с использованием потенциалов взаимодействия:  
- потенциал Ленарда-Джонса;

- потенциал Бермингемма;
  - потенциал Терсоффа;
  - Потенциал Морзе;
2. Моделирование структуры наночастиц диаметрами (1-100нм) из первых принципов:
- углерод;
  - золото;
  - кремний

### ***К рейтинг-контролю 3***

1. Расчет изменения теплоемкости частиц в зависимости от диаметра и структуры связей;
2. Моделирование процесса осаждения тонкой пленки с использованием методов Монте-Карло;
3. Моделирование процесса осаждения тонкой пленки с использованием метода частица-кластер;

**Промежуточная аттестация** проходит в форме зачета. Вопросы охватывают всю тематику, рассмотренную в ходе представления рефератов в течение семестра.

#### Вопросы к зачету

1. Методы классификации наноматериалов.
2. Размерные эффекты в наноматериалах.
3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
7. Потенциалы парного взаимодействия
8. Ближнедействующие потенциалы
9. Дальнедействующие потенциалы
10. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов
11. Принципы и алгоритмы стеганографии.
12. Методы частиц
13. Сеточные модели
14. Гибридные модели (частицы+сетка)
15. Модели с разномасштабными явлениями
16. Стационарные и динамические задачи моделирования
17. Гидродинамические метода моделирования движения частиц
18. Квантовый метод Монте-Карло
19. Объемные методы Монте-Карло
20. Метод Хартри-Фока

21. Метод сильной связи
22. Полуэмпирические методы
23. Моделирование структуры материалов из первых принципов:
24. Моделирование структур кластеров из первых принципов
25. Теория функционала плотности

**Самостоятельная работа** студентов включает в себя:

Подготовку рефератов (подбор источников по заданной теме, их анализ, написание текста, подготовку к докладу). Контроль осуществляется на занятиях. После доклада остальные студенты задают вопросы, что является необходимым условием успешного прохождения текущего контроля успеваемости (количество заданных каждым слушателем вопросов фиксируется преподавателем). На основе представленного доклада и качества ответов на вопросы преподавателем совместно со студентами принимается решение об оценке за подготовленный реферат (по десятибалльной шкале, пересчитываемой затем в баллы рейтинг-контроля). Время на доклад и обсуждение определяется при распределении тем рефератов в зависимости от состава учебной группы и может корректироваться на конкретном занятии в зависимости от текущей явки и подготовленности докладчиков.

1. Разработку программ по моделированию формирования наноматериалов. Студент показывает программу преподавателю. Преподаватель тестирует её работу, слушает пояснения студента по сути реализованного алгоритма и способах его программной реализации.

2. Работу с дополнительной литературой по вопросам, связанным с материалом аудиторных занятий. Контроль осуществляется на экзамене. Студент должен продемонстрировать освоенные самостоятельно знания во время ответов на экзаменационные вопросы.

Распределение видов самостоятельной работы по разделам курса.

Раздел 1. Работа с дополнительной литературой Подготовка реферата.  
Подготовка лабораторной работы

Раздел 2. Работа с дополнительной литературой Подготовка реферата.  
Подготовка лабораторной работы

Раздел 3. Работа с дополнительной литературой Подготовка реферата.  
Подготовка лабораторной работы

**Темы рефератов:**

1. Методы классификации наноматериалов.
2. Размерные эффекты в наноматериалах.
3. Изменение электрофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
4. Изменение теплофизических характеристик материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
5. Изменение магнитных свойств материалов при переходе к наноразмерным масштабам.
6. Изменение структуры материалов при переходе к наноразмерным масштабам.

7. Потенциалы парного взаимодействия
8. Ближнедействующие потенциалы
9. Дальнедействующие потенциалы
10. Потенциалы учитывающие структурные особенности материалов
11. Принципы и алгоритмы стеганографии.
12. Методы частиц
13. Сеточные модели
14. Гибридные модели (частицы+сетка)
15. Модели с разномасштабными явлениями
16. Стационарные и динамические задачи моделирования
17. Гидродинамические метода моделирования движения частиц
18. Квантовый метод Монте-Карло
19. Объемные методы Монте-Карло
20. Метод Хартри-Фока
21. Метод сильной связи
22. Полуэмпирические методы
23. Моделирование структуры материалов из первых принципов:
24. Моделирование структур кластеров из первых принципов
25. Теория функционала плотности

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

### **а) основная литература:**

1. Электронное издание на основе: Наноматериалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. - 4-е изд. (эл.). - Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 368 с.).- М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - (Нанотехнологии).-Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-9963-2531-3. (ЭБС Косультант студента <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996325313.html> )

2. Электронное издание на основе: Неорганические наноматериалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Э. Г. Раков.-2-е изд. (эл.).- Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 480 с.).- М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015.- (Нанотехнологии).-Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". -ISBN 978-5-9963-2927-4. (ЭБС Косультант студента <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329274.html> )

3. Электронное издание на основе: Математическое моделирование в механике сплошных сред [Электронный ресурс] / Р. Темам, А. Миранвиль ; пер. с англ. - 2-е изд. (эл.). - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. - 320 с. : ил. - (Математическое моделирование). - ISBN 978-5-9963-2312-8. (ЭБС Косультант студента <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323128.html> )

4. Электронное издание на основе: Королёв А.Л. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум [Электронный ресурс] / А.Л. Королёв. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. - 296 с.: ил. -



(Педагогическое образование). - ISBN 978-5-9963-2255-8. (ЭБС Косультант студента <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html> )

5. Практикум по выполнению лабораторных работ по дисциплине "Математическое моделирование в нанотехнологиях" [Электронный ресурс] / А. О. Кучерик, Д. Н. Бухаров ; Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (ВлГУ) .— Электронные текстовые данные (1 файл: 240 Кб) .— Владимир : Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (ВлГУ), 2013 .— 49 с. : ил., табл. — Заглавие с титула экрана .— Библиогр.: с. 48-49 .— Свободный доступ в электронных читальных залах библиотеки .— Microsoft Office Word 2007 .— <URL:<http://e.lib.vlsu.ru/bitstream/123456789/2868/1/00384.docx>>. Библиотека ВлГУ

#### **б) дополнительная литература:**

1. Электронное издание на основе: Компьютерное моделирование математических задач. Элективный курс [Электронный ресурс] : учебное пособие / Р. Р. Сулейманов. - Эл. изд. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 381 с. - ISBN 978-5-9963-1484-3. (ЭБС Косультант студента <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996314843.html> )

2. Барыбин, А. А. Физико-химия наночастиц, наноматериалов и наноструктур [Электронный ресурс] : Учеб. пособие / А. А. Барыбин, В. А. Бахтина, В. И. Томилин, Н. П. Томилина. – Красноярск : СФУ, 2011. - 236 с. - ISBN 978-5-7638-2396-7. (ЭБС Znanium <http://znanium.com/bookread2.php?book=441543> )

3. Имитационное моделирование: Учебное пособие / Н.Б. Кобелев, В.А. Половников, В.В. Девятков; Под общ. ред. д-ра экон. наук Н.Б. Кобелева. - М.: КУРС: НИЦ Инфра-М, 2013. - 368 с.: 70x100 1/16. (переплет) ISBN 978-5-905554-17-9, 1000 экз. (ЭБС Znanium <http://znanium.com/bookread2.php?book=361397> )

#### **в) периодические издания:**

1. Журнал «Российские нанотехнологии». Режим доступа: [http://www.nanorf.ru/science.aspx?cat\\_id=4353](http://www.nanorf.ru/science.aspx?cat_id=4353)

2. Журнал «Успехи физических наук». Архив номеров. Режим доступа: <http://www.ufn.ru/>

3. Журнал «Экспериментальной и технической физики». Архив номеров. Режим доступа: <http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/r/index>

4. Научная электронная библиотека. Режим доступа [elibrary.ru](http://elibrary.ru)

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

Для представления лекционного материала и рефератов студентов используется проекционное оборудование.

Для проверки выполнения лабораторных работ компьютеры с пакетом MathLab и языком программирования Microsoft C++.

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

Рабочую программу составили:

доцент кафедры ФиПМ А. О. Кучерик

ассистент кафедры ФиПМ А. В. Истратов

Рецензент

(представитель работодателя)

ИИИ "ГПР Радуга"

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ФиПМ

Протокол № 11 от 07.04.15 года

Заведующий кафедрой

(ФИО, подпись)

С.М.Аракелян

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника

Протокол № 11 от 07.04.15 года

Председатель комиссии

(ФИО, подпись)

С.М.Аракелян

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