

2014

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

УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по учебно-методической работе


_____ А.А.Панфилов

« 15 » января 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРО - И НАНОСИСТЕМ

Направление подготовки 28.03.02 Наноинженерия

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 промежу- точного контро- ля (экз./зачет)
4	6/(216)	36		54	90	Экзамен(36 час.)
5	5(180)	18		18	108	Экзамен(36 час.)
Итого	11 (396)	54		72	198	2 экз. (72 час)

Владимир 2016

mol

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины «Моделирование микро - и наносистем» направлено на достижение следующих целей ОПОП 28.03.02 «Наноинженерия»:

Код цели	Формулировка цели
Ц1	Подготовка выпускников к <i>научно-исследовательской и инновационной деятельности</i> в области нанотехнологий и нанодиагностики, в том числе междисциплинарных областях, связанных с выбором необходимых методов исследования, модифицирования существующих и разработки новых технологий исходя из задач конкретного исследования.
Ц2	Подготовка выпускников к <i>проектно-конструкторской и проектно-технологической деятельности</i> , включающей в себя участие в составе коллектива исполнителей в проведении расчетных и проектных работ при разработке процессов нанотехнологий

Целями освоения дисциплины «Моделирование микро - и наносистем» являются:

- обучение студентов основам разработки алгоритмов для решения научно-технических и производственных задач;
- обучение основным численным методам решения математических, научно-технических и производственных задач на современных ЭВМ;
- изучение современных комплексов компьютерной математики.
- формирование у студентов навыков работы в одном из комплексов компьютерной математики, умения пользоваться языком программирования высокого уровня для реализации разрабатываемых алгоритмов с соответствующей оценкой погрешности вычислений для применяемого метода;
- изучение методов формального описания компонентов микро - и наносистем в расчетных моделях;
- изучение методов моделирования при наличии компонентов микро - и наносистем;
- изучение методов моделирования базовых процессов при изготовлении компонентов микро- и наносистем;
- изучение численных методов и комплексов математического программирования при моделировании компонентов и микро- и наносистем.
- формирование у студентов знаний по основам составления моделей наносистем, исследования этих моделей и обработки результатов таких исследований;
- воспитание ответственности за продукт своих разработок.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Моделирование микро - и наносистем» относится к обязательным дисциплинам вариативной части (Б1.В.ОД.5).

Для успешного изучения дисциплины «Моделирование микро - и наносистем» студенты должны быть знакомы с основными положениями курсов «Высшая математика» и «Информатика».

Из дисциплины «Высшая математика» студент должен знать:

- матричные операции;
- множества и операций над ними;
- методы решения дифференциальных уравнений;
- интегральные исчисления;
- Из дисциплины «Информатика» студент должен знать:

- способы описания и виды алгоритмов;
- стандартные алгоритмы обработки массивов (ввод, вывод массивов, их сортировка, нахождение максимальных и минимальных значений);
- алгоритмы вычислений суммы ряда, произведения ряда, вычисления с заданной точностью.
- алгоритмы организации итерационных вычислений.

Дисциплина «Моделирование микро- и наносистем» является частью блока дисциплин посвященных методам математического моделирования и теоретическому изучению свойств и поведения наноструктурированных объектов, наносистем и процессов.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

После изучения данной дисциплины студент приобретает знания, умения и опыт, соответствующие результатам ОПОП направления 28.03.02:

Р1, Р2, Р4, Р5 (расшифровка результатов обучения приводится в ОПОП направления 28.03.02).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты обучения, согласующиеся с формируемыми компетенциями ОПОП:

способностью в составе коллектива участвовать в разработке макетов изделий и их модулей, разрабатывать программные средства, применять контрольно- измерительную аппаратуру для определения технических характеристик макетов (ПК-1):

знать: инженерные комплексы для создания макетов изделий и их модулей;

уметь: применять инженерные комплексы при разработке макетов изделий и их модулей;

владеть: навыками использования инженерных комплексов при разработке макетов изделий и их модулей;

способностью в составе коллектива исполнителей участвовать в проведении расчетных работ (по существующим методикам) при проектировании нанообъектов и формируемых на их основе изделий (включая электронные, механические, оптические) (ПК-6):

знать: специализированные программные средства, обеспечивающие математическое моделирование наносистем;

уметь: применять математические методы и численное программирование при решении задач в области моделирования процессов на уровне микро- и наносистем;

владеть: навыками применения прикладных программных средств в области моделирования объектов наносистем.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4 семестр: Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 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
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	СРС	кп / кр		
1	Раздел 1	4									
1.1	Общие понятия математического моделирования. Классификация математических моделей. Требования, предъявляемые к математическим моделям.		1	2						1/50%	Рейтинг-контроль №1
1.2	Современные компьютерные технологии для решения научных и производственных задач. Современные расчетные комплексы		2	2		6		10		4/50%	
1.3	Понятие алгоритма. Способы описания алгоритмов. Типовые структуры алгоритмов. Структурный синтез алгоритмов		3	4		6		10		5/50%	
1.4	Аналитические и численные методы решения задач. Прямые и итерационные методы. Погрешности вычислений, источники погрешностей, уменьшение погрешностей, устойчивость, корректность, сходимость.		5	4		6		10		5/50%	
2	Раздел 2										
2.1	Численное интегрирование: метод трапеций; метод Симпсона; квадратурные формулы интегрирования	7	4		6		10		5/50%	Рейтинг-контроль №2	
2.2	Интерполяционные формулы Лагранжа, Ньютона. Численное дифференцирование: аппроксимация производных, погрешность численного дифференцирования	9	4		6		10		5/50%		
2.3	Методы решения ал-	11	4		6		10		5/50%		

	гебраических уравнений: метод последовательных приближений, метод Ньютона-Рафсона.									
3	Раздел 3									
3.1	Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера, метод Рунге-Кутты, метод прогноза и коррекции.	13	4		6		10		5/50%	Рейтинг-контроль №3
3.2	Методы решения систем линейных уравнений: метод Гаусса, итерационный метод Гаусса-Зейделя. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Зейделя, метод Ньютона.	15	4		6		10		5/50%	
3.3	Метод Монте-Карло при моделировании случайных процессов. Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных.	17	4		6		10		5/50%	
ИТОГО			36		54		90		45/50%	Экзамен (36 час.)

5 семестр: Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единицы, 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
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	СРС	кп / кр		
1	Раздел 1 Моделирование процессов теплового и механического взаимодействия микро- и нанообъектов и систем	5									
1.1	Механика контактного взаимодействия деформируемых тел. Особенности решения задач контактного взаимодействия при наличии наноструктурированных покрытий на поверхностях контакта.		1	2		2		12		2/50%	Рейтинг-контроль №1
1.2	Уравнение теплопроводности, постановка краевой задачи. Граничные и начальные условия. Моделирование теплопередачи при наличии наноструктурированных покрытий.		3	2		2		12		2/50%	
1.3	Моделирование тепловых процессов лазерных микро- и нанотехнологий. Уравнение теплопроводности при движущемся источнике тепла, моделирование процессов лазерной обработки детали сканирующим пучком		5	2		2		12		2/50%	
2	Раздел 2. Методы моделирования, учитывающие влияние структуры на теплофизические характеристики микро- и нанообъектов и систем.										
2.1	Применение метода источников для исследования температурного распределения в облучаемом объекте при лазерной обработке поверхности.		7	2		2		12		2/50%	Рейтинг-контроль №2
2.2	Моделирование теплофизических свойств		9	2		2		12		2/50%	

	наноструктурных композиционных материалов: тепловое расширение наноструктурных композиционных материалов, с учетом влияния вида и формы частиц наполнителя, свойств матрицы, адгезии и анизотропии свойств; теплоемкость наноструктурных композиционных материалов; теплопроводность наноструктурных композиционных материалов.									
2.3	Механические свойства наночастиц. Моделирование механических свойств наночастиц и наносистем методами квантовой механики.	11	2		2		12		2/50%	
3	Раздел 3. Моделирование процессов структурирования, деформирования и разрушения микро- и нанообъектов и систем.									
3.1	Моделирование атомной структуры и формы нанообъектов. Электронная структура наноразмерных систем.	13	2		2		12		2/50%	Рейтинг-контроль №3
3.2	Теоретические подходы к общим принципам описания квантовых механизмов процессов самоорганизации и самосборки неравновесных квантовых наносистем.	15	2		2		12		2/50%	
3.3	Многомасштабное моделирование процессов деформирования и разрушения наноструктурных материалов, микро- и наноразмерных систем.	17	2		2		12		2/50%	
ИТОГО			18		18		108		18/50%	Экзамен (36 час.)

Лекции

4 семестр

Тема 1. Общие понятия математического моделирования. Классификация математических моделей. Требования, предъявляемые к математическим моделям.

Тема 2. Современные компьютерные технологии для решения научных и производственных задач. Современные расчетные комплексы.

Тема 3. Понятие алгоритма. Способы описания алгоритмов. Типовые структуры алгоритмов. Структурный синтез алгоритмов.

Тема 4. Аналитические и численные методы решения задач. Прямые и итерационные методы. Погрешности вычислений, источники погрешностей, уменьшение погрешностей, устойчивость, корректность, сходимость.

Тема 5. Численное интегрирование: метод трапеций; метод Симпсона; квадратурные формулы интегрирования.

Тема 6. Интерполяционные формулы Лагранжа, Ньютона. Численное дифференцирование: аппроксимация производных, погрешность численного дифференцирования.

Тема 7. Методы решения алгебраических уравнений: метод последовательных приближений, метод Ньютона-Рафсона.

Тема 8. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера, метод Рунге-Кутты, метод прогноза и коррекции.

Тема 9. Методы решения систем линейных уравнений: метод Гаусса, итерационный метод Гаусса-Зейделя. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Зейделя, метод Ньютона.

Тема 10. Метод Монте-Карло при моделировании случайных процессов. Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных.

5 семестр

Тема 1. Механика контактного взаимодействия деформируемых тел. Особенности решения задач контактного взаимодействия при наличии наноструктурированных покрытий на поверхностях контакта.

Тема 2. Уравнение теплопроводности, постановка краевой задачи. Граничные и начальные условия. Моделирование теплопередачи при наличии наноструктурированных покрытий.

Тема 3. Моделирование тепловых процессов лазерных микро– и нанотехнологий. Уравнение теплопроводности при движущемся источнике тепла, моделирование процессов лазерной обработки детали сканирующим пучком.

Тема 4. Основные принципы и технологии компьютерного моделирования эволюции под нагрузкой мезообъемов конструкционной нанокерамики.

Тема 5. Моделирование теплофизических свойств наноструктурных композиционных материалов:

- тепловое расширение наноструктурных композиционных материалов, с учетом влияния вида и формы частиц наполнителя, свойств матрицы, адгезии и анизотропии свойств;
- теплоемкость наноструктурных композиционных материалов;
- теплопроводность наноструктурных композиционных материалов.

Тема 6. Механические свойства наночастиц. Моделирование механических свойств наночастиц и наносистем методами квантовой механики.

Тема 7. Моделирование атомной структуры и формы нанообъектов. Электронная структура наноразмерных систем.

Тема 8. Теоретические подходы к общим принципам описания квантовых механизмов процессов самоорганизации и самосборки неравновесных квантовых наносистем.

Тема 9. Многомасштабное моделирование процессов деформирования и разрушения наноструктурных материалов, микро- и наноразмерных систем.

**Тематический план лабораторных работ
4 семестр**

№ пп	Учебно-образовательный раздел. Цели лабораторного практикума	Наименование лабораторных работ
1.	Раздел 1. Цель: Приобретение навыков программирования в среде MATHCAD.	1. Основные элементы языка программирования и визуализации расчетов в системе MATHCAD. Реализация линейных, разветвляющихся и циклических алгоритмов.
2.	Раздел 2. Цель: Приобретение навыков создания программ в среде программирования MATHCAD для решения задач численного интегрирования, дифференцирования и реализации численных методов решения алгебраических уравнений.	1. Численное интегрирование с помощью языка программирования и встроенных приложений системы MATHCAD. 2. Интерполирование и численное дифференцирование с помощью языка программирования и встроенных приложений системы MATHCAD. 3. Решение алгебраических уравнений с помощью языка программирования и встроенных приложений системы MATHCAD.
3.	Раздел 3. Цель: Приобретение навыков создания программ в среде программирования MATHCAD для реализации численных методов решения дифференциальных уравнений, систем линейных и нелинейных уравнений, дифференциальных уравнений в частных производных.	1. Решение дифференциальных уравнений первого и второго порядков методом Рунге-Кутта с помощью языка программирования и встроенных приложений системы MATHCAD. 2. Решение систем линейных и нелинейных уравнений с помощью встроенных приложений системы MATHCAD. 3. Генерация случайных данных. Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных.

5 семестр

№ пп	Учебно-образовательный раздел. Цели лабораторного практикума	Наименование лабораторных работ
1.	Раздел 1. Цель: Приобретение навыков создания моделей наноструктурированных объектов.	1. Моделирование контактного взаимодействия при наличии наноструктурированных покрытий на поверхностях контакта. 2. Моделирование стационарных и нестационарных процессов теплопередачи для объектов с многослойной структурой. 3. Моделирование теплового состояния объекта при лазерном облучении.
2.	Раздел 2. Цель: Приобретение навыков моделирования физико-механических характеристик нанообъектов.	1. Моделирование теплофизических свойств наноструктурных композиционных материалов. 2. Моделирование упругих свойств нанокластеров. 3. Моделирование упруго-пластического состояния образца с нанокompозитным

		покрытием при внедрении индентора.
3.	Раздел 3. Цель: Приобретение навыков моделирования процессов в молекулярных структурах наносистем.	1. Моделирование атомной структуры, вычисление энергии межатомных связей. 2. Моделирование процессов деформирования макроскопических объектов на макро-, мезо- и микроуровнях. 3. Математическое моделирование самосборки и самоорганизация наносистем.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Ориентация на тактические образовательные технологии, являющиеся конкретным способом достижения целей образования в рамках намеченной стратегической технологии. При чтении лекций используется метод проблемного изложения с использованием интерактивной формы проведения занятия. При проведении лабораторных работ используются поисковый и исследовательский методы, в том числе, case study.

Ниже приводится описание образовательных технологий, обеспечивающих достижение планируемых результатов освоения дисциплины. Специфика сочетания методов и форм организации обучения отражается в матрице (см. табл). Перечень методов обучения и форм организации обучения может быть расширен.

Методы и формы организации обучения (ФОО)

ФОО	Лекции	Лабораторные работы	СРС
Методы			
IT-методы			
Работа в команде		+	+
Case study		+	
Игра			
Методы проблемного обучения.	+		
Обучение на основе опыта	+	+	
Опережающая самостоятельная работа			+
Проектный метод			
Поисковый метод		+	+
Исследовательский метод		+	+
Другие методы			

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

4 семестр

Вопросы к рейтинг-контролю №1

1. Особенности решения научных задач на ЭВМ. Принципы построения математических моделей физических процессов.
2. Современные расчетные комплексы. Понятие алгоритма. Способы описания алгоритмов.
3. Типовые структуры алгоритмов. Структурный синтез алгоритмов.
4. Прямые и итерационные методы решения задач.
5. Погрешности вычислений, источники погрешностей, уменьшение погрешностей, устойчивость, корректность, сходимости.
6. Форматы отображения числовых данных.

7. Функции для представления комплексных чисел.
8. Работа с массивами: ввод, вывод одномерных и двумерных массивов.
9. Работа с массивами: нахождение максимального значения массива.
10. Работа с массивами: нахождение минимального значения массива.
11. Работа с массивами: сортировка массива по возрастанию.
12. Работа с массивами: сортировка массива по убыванию.
13. Алгоритм вычисления суммы n членов ряда.
14. Алгоритм вычисления суммы ряда с заданной точностью.
15. Алгоритм вычисления произведения n членов ряда.

Вопросы к рейтинг-контролю №2

1. Численное интегрирование: метод трапеций
2. Численное интегрирование: метод Симпсона.
3. Численное интегрирование: квадратурные формулы Чебышева.
4. Численное интегрирование: квадратурные формулы Гаусса.
5. Интерполирование: интерполяционные формулы Лагранжа.
6. Интерполирование: интерполяционные формулы Ньютона.
7. Применение интерполяционных формул для экстраполяции.
8. Численное дифференцирование: аппроксимация производных.
9. Численное дифференцирование: частные производные.
10. Численное дифференцирование: погрешность численного дифференцирования.
11. Методы решения алгебраических уравнений: метод последовательных приближений.
12. Методы решения алгебраических уравнений: метод Ньютона-Рафсона.
13. Вычисление корней полинома.
14. Вычисление производной полинома.
15. Вычисление полиномов, умножение и деление полиномов.

Вопросы к рейтинг-контролю №3

1. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера.
2. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Рунге-Кутты.
3. Методы решения дифференциальных уравнений: метод прогноза и коррекции.
4. Методы решения дифференциальных уравнений второго порядка.
5. Методы решения систем линейных уравнений: метод Гаусса.
6. Методы решения систем линейных уравнений: итерационный метод Гаусса-Зейделя.
7. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Зейделя.
8. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Ньютона.
9. Метод Монте-Карло при моделировании случайных процессов.
10. Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных.
11. Файловые операции в MathCAD.
12. Средства MathCAD для работы с двухмерной графикой.
13. Средства MathCAD для работы с трехмерной графикой.
14. Средства MathCAD для работы со звуком.

5 семестр

Вопросы к рейтинг-контролю №1

1. Дать определения: тепловой поток, тепловая мощность, температурное поле, изотерма, температурный градиент.
2. Закон Фурье.
3. Дифференциальное уравнение теплопроводности, граничные условия теплообмена.

4. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 1-го рода при стационарном режиме
5. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 2 - го рода при стационарном режиме
6. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 3 – го рода при стационарном режиме
7. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 1 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
8. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 2 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
9. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 3 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
10. Теплообмен излучением. Закон Кирхгофа.
11. Теплообмен излучением. Закон Ламберта.
12. Теплообмен излучением. Закон Планка.
13. Теплообмен излучением. Закон Вина.
14. Теплообмен излучением. Закон Стефана – Больцмана.
15. Теплообмен излучением. Поверхностная плотность потока излучения, спектральная плотность потока излучения, угловая плотность потока излучения, интенсивность излучения.
16. Коэффициент черноты, виды лучистых потоков.
17. Дифференциальное уравнение конвективного теплообмена.
18. Расчет температурных полей методом источников.
19. Применение метода источников для исследования теплового состояния облучаемого объекта.

Вопросы к рейтинг-контролю №2

1. Теория упругости, вариационная постановка.
2. Упруго-пластическое деформирование. Теория течения.
3. Теория теплового расширения кристаллов
4. Феноменологическая теория теплового расширения твёрдых тел
5. Тепловое расширение наноструктурных композиционных материалов
6. Тепловое расширение анизотропных наноструктурных композиционных материалов
7. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Тарасова.
8. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Лифшица.
9. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Хечта - Стокмайера.
10. Механизмы теплопереноса в твердых телах.
11. Модели Айлермана для расчета теплопроводности наноструктурных композиционных материалов
12. Ключевая роль производства энтропии в неравновесной термодинамике локальных структурных превращений в твердых телах в неоднородных полях внешних воздействий.

Вопросы к рейтинг-контролю №3

1. Локальные зоны гидростатического растяжения как термодинамическая основа зарождения всех видов дефектов, пор, трещин и изменения структурно-фазового состояния.
2. Роль квазиаморфной фазы в стабилизации наноструктурных кристаллических состояний.
3. История возникновения понятий самосборки и самоорганизации, эволюция понятий, сходство и отличие.
4. Основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках.
5. Движущие силы самосборки: взаимодействия основных компонентов системы в процессе самосборки
6. Супрамолекулярные системы, как механизм образования наноструктур.
7. Молекулярная самосборка, как механизм образования наноструктур.
8. Модели нанокластеров.
9. Использование моделей квантово-механического уровня для описания процессов образования и эволюции наносистем.
10. Использование методов молекулярной динамики для описания процессов образования и эволюции наносистем.
11. Использование методов физической мезомеханики и неравновесной термодинамики для описания процессов образования и эволюции наносистем.
12. Использование метода Монте-Карло для описания процессов образования и эволюции наносистем
13. Раскройте понятия масштабных и структурных уровней при решении задач деформации и разрушения наноструктурных материалов.
14. Алгоритм моделирования процесса деформации макроскопического объекта, в котором процесс деформации развивается на разных масштабных уровнях.

Вопросы к экзамену (4 семестр)

1. Особенности решения научных задач на ЭВМ. Принципы построения математических моделей физических процессов.
2. Современные расчетные комплексы. Понятие алгоритма. Способы описания алгоритмов. Типовые структуры алгоритмов. Структурный синтез алгоритмов
3. Аналитические и численные методы решения задач. Прямые и итерационные методы.
4. Погрешности вычислений, источники погрешностей, уменьшение погрешностей, устойчивость, корректность, сходимость.
5. Численное интегрирование: метод трапеций
6. Численное интегрирование: метод Симпсона.
7. Численное интегрирование: квадратурные формулы Чебышева.
8. Численное интегрирование: квадратурные формулы Гаусса.
9. Интерполирование: интерполяционные формулы Лагранжа.
10. Интерполирование: интерполяционные формулы Ньютона.
11. Применение интерполяционных формул для экстраполяции.
12. Численное дифференцирование: аппроксимация производных, частные производные, погрешность численного дифференцирования.
13. Методы решения алгебраических уравнений: метод последовательных приближений.
14. Методы решения алгебраических уравнений: метод Ньютона-Рафсона.
15. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Эйлера.
16. Методы решения дифференциальных уравнений: метод Рунге-Кутты.
17. Методы решения дифференциальных уравнений: метод прогноза и коррекции.
18. Методы решения систем линейных уравнений: метод Гаусса.
19. Методы решения систем линейных уравнений: итерационный метод Гаусса-Зейделя.

20. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Зейделя.
21. Методы решения систем нелинейных уравнений: метод Ньютона.
22. Метод Монте-Карло при моделировании случайных процессов.
23. Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных.

Вопросы к экзамену (5 семестр)

1. Дать определения: тепловой поток, тепловая мощность, температурное поле, изо-терма, температурный градиент.
2. Закон Фурье.
3. Дифференциальное уравнение теплопроводности, граничные условия теплообмена.
4. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 1 – го рода при стационарном режиме
5. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 2 – го рода при стационарном режиме
6. Решение уравнения теплопроводности для плоской стенки с граничными условиями 3 – го рода при стационарном режиме
7. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 1 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
8. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 2 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
9. Решение уравнения теплопроводности для многослойной плоской стенки с граничными условиями 3 – го рода при стационарном режиме. Термическое сопротивление слоя.
10. Теплообмен излучением. Закон Кирхгофа.
11. Теплообмен излучением. Закон Ламберта.
12. Теплообмен излучением. Закон Планка.
13. Теплообмен излучением. Закон Вина.
14. Теплообмен излучением. Закон Стефана – Больцмана.
15. Теплообмен излучением. Поверхностная плотность потока излучения, спектральная плотность потока излучения, угловая плотность потока излучения, интенсивность излучения.
16. Коэффициент черноты, виды лучистых потоков.
17. Дифференциальное уравнение конвективного теплообмена.
18. Расчет температурных полей методом источников.
19. Применение метода источников для исследования теплового состояния облучаемого объекта.
20. Теория упругости, вариационная постановка.
21. Упруго-пластическое деформирование. Теория течения.
22. Теория теплового расширения кристаллов
23. Феноменологическая теория теплового расширения твёрдых тел
24. Тепловое расширение наноструктурных композиционных материалов
25. Тепловое расширение анизотропных наноструктурных композиционных материалов
26. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Тарасова.
27. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Лифшица.
28. Модели теплоемкости наноструктурных композиционных материалов. Модель Хечта - Стокмайера.
29. Механизмы теплопереноса в твердых телах.

30. Модели Айлермана для расчета теплопроводности наноструктурных композиционных материалов
31. Ключевая роль производства энтропии в неравновесной термодинамике локальных структурных превращений в твердых телах в неоднородных полях внешних воздействий.
32. Локальные зоны гидростатического растяжения как термодинамическая основа зарождения всех видов дефектов, пор, трещин и изменения структурно-фазового состояния.
33. Роль квазиаморфной фазы в стабилизации наноструктурных кристаллических состояний.
34. История возникновения понятий самосборки и самоорганизации, эволюция понятий, сходство и отличие.
35. Основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках.
36. Движущие силы самосборки: взаимодействия основных компонентов системы в процессе самосборки
37. Супрамолекулярные системы, как механизм образования наноструктур.
38. Молекулярная самосборка, как механизм образования наноструктур.
39. Модели нанокластеров.
40. Использование моделей квантово-механического уровня для описания процессов образования и эволюции наносистем.
41. Использование методов молекулярной динамики для описания процессов образования и эволюции наносистем.
42. Использование методов физической мезомеханики и неравновесной термодинамики для описания процессов образования и эволюции наносистем.
43. Использование метода Монте-Карло для описания процессов образования и эволюции наносистем
44. Раскройте понятия масштабных и структурных уровней при решении задач деформации и разрушения наноструктурных материалов.
45. Алгоритм моделирования процесса деформации макроскопического объекта, в котором процесс деформации развивается на разных масштабных уровнях.

Задачи к экзамену

1. Вычислить в MatchCAD определенный интеграл на произвольном интервале, определить абсолютную погрешность вычислений:

Интеграл		Интеграл	
1.	$\int \frac{dx}{ax+b} = \frac{1}{a} \ln ax+b , a \neq 0$	6.	$\int \frac{xdx}{x^2+a^2} = \frac{1}{2} \ln(x^2+a^2)$
2.	$\int \frac{dx}{(ax+b)^2} = -\frac{1}{a} \frac{1}{ax+b}, a \neq 0$	7.	$\int \frac{xdx}{(x^2+a^2)^2} = -\frac{1}{2(x^2+a^2)}$
3.	$\int \frac{xdx}{ax+b} = \frac{x}{a} - \frac{b}{a^2} \ln ax+b , a \neq 0$	8.	$\int \frac{x^2 dx}{x^2+a^2} = x - a \cdot \operatorname{arctg} \frac{x}{a}, a \neq 0$
4.	$\int \frac{x^2 dx}{ax+b} = \frac{x^2}{2a} - \frac{bx}{a^2} + \frac{b^2}{a^3} \ln ax+b , a \neq 0$	9.	$\int \frac{dx}{x(x^2+a^2)} = \frac{1}{2a^2} \ln \frac{x^2}{x^2+a^2}, a \neq 0$
5.	$\int \frac{dx}{x^2+a^2} = \frac{1}{a} \operatorname{arctg} \frac{x}{a}, a \neq 0$	10.	$\int \frac{x^2 dx}{a^2-x^2} = -x + \frac{a}{2} \ln \left \frac{a+x}{a-x} \right $

2. Решить в MatchCAD алгебраическое уравнение, определить абсолютную погрешность вычислений методом подстановки.

Уравнение		Уравнение	
1.	$(2x^2 + 3x - 1)^2 - 5(2x^2 + 3x + 3) + 24 = 0$	4.	$2x^2 + 3x + \sqrt{2x^2 + 3x + 9} = 33$

2.	$(x-1)^3 + (2x+3)^3 - 27x^3 - 8 = 0$	5.	$(x^2 + x + 2)(x^2 + x + 3) = 6$
3.	$x^5 + (6-x)^5 - 1056 = 0$	6.	$\sqrt[3]{3-x} + \sqrt[3]{6+x} = 3$

3. Используя MatchCAD, построить график и вывести в виде таблицы с произвольным шагом решение дифференциального уравнения на интервале $[0; 1]$

№ п/п	Дифференциальное уравнение $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$	Н.У. (y_0)
1.	$x^3 \sin y + 1$	0.0
2.	$x^2 \sin y - 1$	0.1
3.	$\sqrt{y^2 + x^3}$	0.3
4.	$1/(1+y^2) + xy$	0.1
5.	$\cos y + xy$	0.2
6.	$x^3 \cos y + 0.1$	0.4
7.	$\cos(xy) - 0.5$	0.5
8.	$e^{-y} + e^x - 2$	0.0

4. Решить систему линейных уравнений с использованием матричных операций MatchCAD

1	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 2 & -4 & 3 & 1 \\ -1 & 5 & -7 & -3 \\ 10 & -2 & 4 & 4 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 7 \\ -24 \\ 34 \\ -6 \end{bmatrix}$	2	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 5 & -3 & 4 & -2 \\ 10 & 3 & -4 & 2 \\ 7 & -5 & 8 & -10 \\ 4 & 5 & -8 & 10 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 4 \\ 11 \\ 0 \\ 11 \end{bmatrix}$
3	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 & 1 \\ 4 & 3 & -1 & 2 \\ 8 & 5 & -3 & 4 \\ 3 & 3 & -2 & 2 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 12 \\ 6 \end{bmatrix}$	4	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -6 & 4 \\ 3 & -1 & -6 & -4 \\ 2 & 3 & 9 & 2 \\ 3 & 2 & 3 & 8 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 6 \\ 2 \\ 6 \\ -7 \end{bmatrix}$
5	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 3 & 4 \\ 7 & 14 & 20 & 27 \\ 5 & 10 & 16 & 19 \\ 3 & 5 & 6 & 13 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2 \\ 5 \end{bmatrix}$	6	$a_{ij} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 3 & 4 \\ 4 & -2 & 5 & 6 \\ 6 & -3 & 7 & 8 \\ 8 & -4 & 9 & 10 \end{bmatrix}; b_i = \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \\ 11 \end{bmatrix}$

Самостоятельная работа студентов

Перечень научных проблем и направлений научных исследований:

4 семестр

- механизм образования наноструктур;
- наноструктурные материалы;
- функциональные и конструкционные наноматериалы.

5 семестр

- механизм образования наноструктур;
- наноструктурные материалы;
- функциональные и конструкционные наноматериалы.

Темы индивидуальных заданий:

4 семестр

1. Изучение средств MathCAD для реализации численных методов (4 семестр)
2. Моделирование процессов микро- и наносистем с использованием математического комплекса MathCAD (5 семестр).

Темы, выносимые на самостоятельную проработку:

- Погрешности вычислений, источники погрешностей, уменьшение погрешностей, устойчивость, корректность, сходимость.
- Методы решения дифференциальных уравнений второго порядков с использованием пакета MathCAD.
- Использование метода Монте-Карло при решении дифференциальных уравнений в частных производных с использованием пакета MathCAD.
- Программные средства MathCAD для работы с графикой и звуком.

5 семестр

- супрамолекулярные системы;
- модели нанокластеров;
- углеродные нанотрубки (структура и свойства);
- фуллерены (структура и свойства);
- полупроводниковые гетероструктуры (гетеропереходы, гетероструктуры, сверхрешетки);
- органические проводники и полупроводники;
- фотонные кристаллы;
- пленки поверхностно-активных веществ;
- ДНК как компонент наноструктур
- молекулярная самосборка.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература (библиотечная система ВлГУ):

1. Численные методы [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Е.В. Карманова. - 2-е изд., стер. - М.: ФЛИНТА, 2015. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976523036.html>.
2. Материалы и методы нанотехнологий [Электронный ресурс] / Старостин В.В. - М.: БИНОМ, 2015. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326013.html>.
3. Введение в нанотеплофизику [Электронный ресурс] / А.С. Дмитриев. - М.: БИНОМ, 2015. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996328703.html>.
4. Основы наноструктурного материаловедения. Возможности и проблемы [Электронный ресурс] / Андриевский Р.А. - М.: БИНОМ, 2014. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996325177.html>.
5. Поверхность и межфазные границы в окружающей среде. От наноуровня к глобальному масштабу [Электронный ресурс] / П. Морис; пер. с англ. под ред. В.И. Свитова. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ, 2015. - (Учебник для высшей школы). - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329793.html>.

б) дополнительная литература (библиотечная система ВлГУ):

1. Основы нанотехнологии [Электронный ресурс] / Н.Т. Кузнецов, В.М. Новоторцев, В.А. Жабрев, В.И. Марголин. - М.: БИНОМ, 2014. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323784.html>.
2. Квантовая механика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ, 2015. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996329892.html>.
3. Наноматериалы [Электронный ресурс] / Д.И. Рыжонков, В.В. Лёвина, Э.Л. Дзидзигури. - М.: БИНОМ, 2014. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996325313.html>.
4. Справочник по Mathcad 11 [Электронный ресурс] / Кудрявцев Е.М. - М.: ДМК Пресс, 2009. - <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5940742777.html>.

г) периодические издания:

1. Математическое моделирование. — Москва: Наука.
2. Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. — Москва: Европейский центр по качеству.

в) Internet-ресурсы:

www.sistemair.ru/dok/mathcad12
www.intuit.ru/studies/courses/12176/1169/lecture/19595
www.nanonewsnet.ru
nanodigest.ru
www.portalnano.ru
nano-info.ru

Учебно-методические издания

1. Иванченко А.Б. Методические указания к лабораторным работам по дисциплине «Моделирование микро - и наносистем» для студентов направления 28.03.02 [Электронный ресурс] / сост. Иванченко А.Б.; Влад. гос. ун-т. ТМС - Владимир, 2016. - Доступ из корпоративной сети ВлГУ. - Режим доступа: <http://cs.cdo.vlsu.ru/>
2. Иванченко А.Б. Методические рекомендации к выполнению самостоятельной работы по дисциплине «Моделирование микро - и наносистем» для студентов

направления 28.03.02 [Электронный ресурс] / сост. Иванченко А.Б.; Влад. гос. ун-т. ТМС - Владимир, 2016. - Доступ из корпоративной сети ВлГУ. - Режим доступа: <http://cs.cdo.vlsu.ru/>

3. Иванченко А.Б. Оценочные средства по дисциплине «Моделирование микро - и наносистем» для студентов направления 28.03.02[Электронный ресурс] / сост. Иванченко А.Б.; Влад. гос. ун-т. ТМС - Владимир, 2016. - Доступ из корпоративной сети ВлГУ. - Режим доступа: <http://cs.cdo.vlsu.ru/>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1) Портал Центр дистанционного обучения ВлГУ [электронный ресурс] / - Режим доступа: <http://cs.cdo.vlsu.ru/>

2) Раздел официального сайта ВлГУ, содержащий описание образовательной программы [электронный ресурс] / - Режим доступа: Образовательная программа 28.03.02 «Наноинженерия» <http://op.vlsu.ru/index.php?id=169>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Суперкомпьютер «СКИФ МОНОМАХ» производительностью 4,7 Т-Флопс.
2. Четыре компьютерных класса, обеспечивающие связь с суперкомпьютером «СКИФ МОНОМАХ».
2. Лицензионное программное обеспечение: университетские версии CAD/CAM/CAE-систем ANSYS, SolidWorks Simulation, математические пакеты Mathcad, MATLAB, система управления вычислительными экспериментами и визуализации результатов моделирования LabDesk, наноконструктор (Desktop-версия), квантово-механический комплекс моделирования и исследования свойств молекул GAMESS и Fire-Fly.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС
ВО по направлению 28.03.02 «Наноинженерия»

Рабочую программу составил к.т.н., доцент Иванченко А.В. АИЧ
(ФИО, подпись)

Рецензент (представитель работодателя):
ЗАО «Рост-Плюс», заместитель директора

(место работы, должность, ФИО, подпись)



Ионов В.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Технология машиностроения
Протокол № 5/1 от 14.01.2016 года

Заведующий кафедрой д.т.н., профессор Морозов В.В.

(ФИО, подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 28.03.02 «Наноинженерия»

Протокол № 5/1 от 14.01.2016 года

Председатель комиссии д.т.н., профессор Морозов В.В.

(ФИО, подпись)

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на 2016/2017 учебный год

Протокол заседания кафедры № 1 от 1.09.2016 года

Заведующий кафедрой д.т.н., профессор Морозов В.В. _____



Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой д.т.н., профессор Морозов В.В. _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой д.т.н., профессор Морозов В.В. _____