

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ**

УТВЕРЖДАЮ



Декан факультета

Л.Р.Фионова

« 03 » 07 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**М1.В.07 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ НАНОТЕХНОЛОГИЙ**

Направление подготовки 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

Направленность (магистерская программа) «Математическое моделирование в экономике и технике»

Квалификация выпускника – магистр

Форма обучения – очная

Пенза, 2019

## 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины М1.В.07 «Математические модели и методы нанотехнологий» являются

- формирование у студентов современного естественнонаучного мировоззрения;
- овладение общенаучными и общеинженерными дисциплинами на необходимом научном уровне;
- развитие логического и алгоритмического мышления.

Формируемые дисциплиной знания и умения готовят выпускника данной образовательной программы к выполнению следующих трудовых функций:

- D/03.7 Планирование аналитических работ в информационно-технологическом (далее - ИТ) проекте (профстандарт 06.022 «Системный аналитик»),
- D/04.7 Организация аналитических работ в ИТ-проекте (профстандарт 06.022 «Системный аналитик»),
- D/05.7 Контроль аналитических работ в ИТ-проекте (профстандарт 06.022 «Системный аналитик»),
- В/01.6 Проведение патентных исследований и определение характеристик продукции (услуг) (профстандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»),
- В/02.6 Проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований (профстандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»),
- В/03.6 Руководство группой работников при исследовании самостоятельных тем (профстандарт 40.011 «Специалист по научно-исследовательским и опытно-конструкторским разработкам»),
- А/01.6 Руководство разработкой программного кода (профстандарт 06.017 «Руководитель разработки программного обеспечения»),
- А/01.6 Разработка и организация выполнения мероприятий по тематическому плану (профстандарт 40.008 «Специалист по организации и управлению научно-исследовательскими и опытно-конструкторскими работами»),
- А/02.6 Руководство проверкой работоспособности программного обеспечения (профстандарт 06.017 «Руководитель разработки программного обеспечения»),

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры

Учебная дисциплина М1.В.07 «Математические модели и методы нанотехнологий» относится к блоку дисциплин, формируемых участниками образовательных отношений. Она является одной из дисциплин, формирующих профессиональные знания и навыки, характерные для магистра по направлению подготовки «Прикладная математика и информатика». Изучение дисциплины базируется на знаниях студентами следующих курсов учебного плана бакалавриата по направлению 01.03.04 «Прикладная математика».

Основные положения дисциплины должны быть использованы в дальнейшем при изучении следующих дисциплин: «Некорректные задачи, обратные задачи», «Математические модели физики», «Численные методы», «Математические модели физики», «Математическая статистика», «Производственная практика (научно-исследовательская работа)», «Параллельные вычисления и параллельное программирование в численных методах/Облачные вычисления».

ния», «Динамические системы», «Выпуклый анализ и методы оптимизации», «Производственная практика (преддипломная)», «Учебная практика (технологическая)», «Фракталы», «Интегральные уравнения/Вариационное исчисление и вариационные методы».

Освоение теории математических моделей и методов нанотехнологий в комплексе с другими дисциплинами призвано сформировать базу знаний в области применения методов и инструментария компьютерного моделирования в профессиональной сфере деятельности; приобретенные знания также могут помочь в научно-исследовательской работе.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению:

Коды компетенций	Наименование компетенций		Структурные элементы компетенции (в результате освоения дисциплины обучающийся должен:
ПК-1	Способен определить естественно-научную сущность проблем, возникающих в области математического моделирования в экономике и технике, способен создавать и исследовать математические модели для их решения, применяя при этом соответствующий математический аппарат	<p>ПК-1.1 Исследует существующие математические модели экономики и техники, проводит их теоретическое и практическое сравнение</p> <p>ПК-1.2. Создает новые математические модели для решения задач в области экономики и техники и проводит их полное исследование</p> <p>ПК-1.3. Применяет, развивает и совершенствует соответствующий математический аппарат для реализации математических моделей</p>	<p><b>Знать:</b> основные существующие математические модели экономики и техники</p> <p><b>Уметь:</b> создавать новые математические модели для решения задач в области экономики и техники и проводить их полное исследование</p> <p><b>Владеть:</b> математическим аппаратом для реализации математических моделей</p>
ПК-2	Способен проводить научные исследования и получать новые научные и прикладные результаты в области	<p>ПК-2.1 Выбирает, анализирует и сравнивает математические методы для проведения научных исследований в области математического моделирования</p> <p>ПК-2.2 Строит, обосновывает и</p>	<p><b>Знать:</b> математические методы для проведения научных исследований в области математического моделирования</p> <p><b>Уметь:</b> строить, обосновывать и</p>

	математического моделирования в экономике и технике самостоятельно и в составе научного коллектива	исследует математические модели решения задач экономики и техники  ПК-2.3 Исследует работоспособность, адекватность и точность математических моделей с практической точки зрения, проводит анализ результатов моделирования, принимает решение на основе полученных результатов	исследовать математические модели решения задач экономики и техники; проводить анализ результатов моделирования, принимать решение на основе полученных результатов  <b>Владеть:</b> навыками формализации прикладных задач
ПК-3	Способен углубленно анализировать проблемы, постановки и обоснования задач производственно-технологической деятельности для решения задач математического моделирования в экономике и технике	ПК-3.1. Анализирует проблемы, возникающие при построении математических моделей в экономике и технике  ПК-3.2. Обосновывает математические методы решения задач производственно-технологической деятельности  ПК-3.3. Строит, применяет, исследует и сравнивает математические модели, соответствующие задачам производственно-технологической деятельности	<b>Знать:</b> математические модели, соответствующие задачам производственно-технологической деятельности  <b>Уметь:</b> обосновывать математические методы решения задач производственно-технологической деятельности  <b>Владеть:</b> навыками построения, исследования и сравнения математических моделей в экономике и технике
ПК-4	Способен разрабатывать математические модели задач производственно-технологической деятельности в области экономики и техники	ПК-4.1. Строит математические модели анализа и прогноза экономических, технологических и физических процессов ПК-4.2. Разрабатывает и использует для математических моделей численные методы и комплексы программ ПК-4.3 Интерпретирует математическую модель, построенную для одной предметной области, как математическую модель для других предметных областей	<b>Знать:</b> основные задачи, возникающие на стыке математического моделирования и нанотехнологии  <b>Уметь:</b> интерпретировать математическую модель, построенную для одной предметной области, как математическую модель для других предметных областей <b>Владеть:</b> навыками построения математических моделей анализа и прогноза экономических, технологических и физических процессов

#### 4. Структура и содержание дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

##### 4.1. Структура дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 ЗЕТ, 144 ч.

№ п/п	Наименование разделов и тем Дисциплины (модуля)	Семестр	Недели семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов в трудоемкость (в часах)									Формы текущего контроля успеваемости ( по неделям семестра)		
				Аудиторная работа					Самостоятельная работа				Собеседование по лабораторным работам	Проверка контрольн. работ	Проверка реферата
				Всего	Лекция	Практические занятия	Лабораторные занятия	Др. виды контакт. работы	Всего	Подготовка к аудиторным занятиям	Реферат, эссе и др.	Подготовка к экзамену			
1	<b>Раздел 1.</b> Математические модели и методы нанотехнологий	3	1-2	<b>8</b>	<b>4</b>	<b>2</b>	<b>2</b>		<b>30</b>	<b>20</b>	<b>10</b>		3	4	10
1.1	Тема 1.1. Основные определения и понятия нанотехнологий	3	1-2	4	2	1	1		12	10	5		3	4	10
1.2	Тема 1.2. Обзор существующих моделей и методов нанотехнологий	3	1-2	4	2	1	1		13	10	5		3	4	10
2	<b>Раздел 2.</b> Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	3	3-8	<b>24</b>	<b>12</b>	<b>6</b>	<b>6</b>		<b>30</b>	<b>20</b>	<b>10</b>		5	12	10
2.1	Тема 2.1. Учет геометрической симметрии в задачах нанотехнологий	3	3-5	12	6	3	3		12	10	5		5	12	10
2.2	Тема 2.2. Пространственные модели задач нанотехнологий	3	6-8	12	6	3	3		13	10	5		5	12	13

3	<b>Раздел 3. Модели молекулярной динамики</b>	3	9-17	<b>36</b>	<b>18</b>	<b>9</b>	<b>9</b>		<b>11,3</b>	<b>11,3</b>			5	17	13
3.1	Тема 3.1. Моделирование систем макромолекул	3	9-12	16	8	4	4		5	5			15	17	13
3.2	Тема 3.2. Модели сплошной среды для изучения наносистем		13-17	20	10	5	5		6,3	6,3			15	17	13
	<i>Контактная работа</i>							4,7							
	<i>Подготовка к экзамену</i>											36			
	Общая трудоемкость, в часах			72,7	34	17	17	4,7	71,3	60	30	36	Промежуточная аттестация		
													Форма	Семестр	
													Экзамен	1	

## 4.2. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование	Содержание раздела
1.	Математические модели и методы нанотехнологий	Основные определения и понятия нанотехнологий. Обзор существующих моделей и методов нанотехнологий. Виды наноматериалов. Области нанотехнологий. Вычислительные проблемы нанотехнологий. Простейшие модели наносистем.
2.	Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	Учет геометрической симметрии в задачах нанотехнологий. Пространственные модели задач нанотехнологий. Построение структур решений, обладающих свойством полноты при моделировании задач нанотехнологий. Свойство самоподобия и фракталы в наносистемах.
3.	Модели молекулярной динамики	Моделирование систем макромолекул. Модели сплошной среды для изучения наносистем. Молекулярная динамика со связями для моделирования систем макромолекул. Моделирование методом Монте-Карло. Модели сплошной среды для изучения наносистем.

## 5. Образовательные технологии

В процессе изучения дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий» предполагается использовать структурно-логические и интеграционные образовательные технологии, реализуемые посредством:

- лекций в виде вводных, текущих, обзорных и заключительно-обобщающих занятий;
- практических занятий с использованием методов «многократного повторения» (темы 1.1, 2.1, 3.1); по логике мышления – индуктивные, дедуктивные и репродуктивные.
- организации самостоятельной работы на основе личностно-дифференцированного подхода планирования задания в виде воспроизводящей и частично-поисковой работ.
- организации текущего контроля знаний студентов методами: выполнения домашних заданий, оценки активности на практических занятиях и рейтинговой системы общей оценки знаний студентов.

Занятия, проводимые в интерактивных формах, с использованием интерактивных технологий составляют 30% занятий.

В целях реализации индивидуального подхода к обучению студентов, осуществляющих учебный процесс по собственной траектории в рамках индивидуального рабочего плана, изучение данной дисциплины базируется на следующих возможностях: обеспечение внеаудиторной работы со студентами в том числе в электронной образовательной среде с использованием соответствующего программного оборудования, дистанционных форм обучения, возможностей интернет-ресурсов, индивидуальных консультаций и т.д.

Другие виды контактной работы: проведение консультаций, прием экзаменов.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

**6.1. План самостоятельной работы студентов**

№ нед	Тема	Вид самостоятельной работы	Задание	Рекомендуем литература	Количество часов
1-2	Математические модели и методы нанотехнологий	Подготовка к аудиторным	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 1-2	30
3-8	Метод R-функций моделирования задач нанотехнологий	Подготовка к аудиторным занятиям	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 2	30
9 17	Модели молекулярной динамики	Подготовка к аудиторным занятиям	Проработка конспекта лекций	П.7 а) 1 б) 2	11,3
1-17	Все темы	Подготовка к экзамену	Повторить все темы. Изучить теоретический материал.	П.7 1-3	36

**Темы лабораторных работ**

1. Метод Харди-Фока
2. Алгоритмы линейного скейлинга

**1.Собеседование №1 Лабораторная работа « Метод Харди-Фока»**

Назовите основные группы методов, используемых для численного расчета равновесных геометрических и физических свойств многоатомных атомных кластеров.

2. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки первопринципных методов расчета атомных кластеров?
3. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки полуэмпирических методов расчета атомных кластеров?
4. Каковы основные особенности, достоинства и недостатки методов расчета атомных кластеров, основанные на использовании эмпирических потенциалов?
5. В чем заключается суть метода Хартри – Фока?
6. В чем заключается суть метода, основанного на формализме теории функционала плотности?
7. Что утверждает первая теорема Хоенберга – Кона?

**2.Собеседование №2 Лабораторная работа «Алгоритмы линейного скейлинга»**



1. Что такое алгоритм линейного скейлинга? Для чего он применяется?
11. Какие численные методы наиболее целесообразно использовать применительно к фуллереноподобным наноструктурам?
12. Какие численные методы целесообразно использовать применительно к нанотубулярным структурам?
13. Какие численные методы наиболее целесообразно использовать применительно к графеноподобным наноструктурам?
14. Какие численные методы целесообразно использовать применительно к 3D наноструктурам?

### **6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов**

- **Подготовка к аудиторным занятиям** проводится посредством изучения курса лекций, дополнительной литературы, а также решения предложенных задач.
- **Подготовка рефератов и докладов** осуществляется с использованием дополнительной литературы.
- **Подготовка к зачету** - изучение курса лекций, упражнения в решении типовых задач, изучение дополнительной литературы.

### **6.3. Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов**

#### **Контроль освоения компетенций**

№ п/п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Проверка реферата и заслушивание доклада	Разделы 1,2,3	ПК-4,2
2	Защита лабораторных работ	Разделы 1,2,3	ПК-4,2

Материалы для проведения текущего контроля знаний и промежуточной аттестации составляют отдельный документ – Фонд оценочных средств по дисциплине «Математические модели и методы нанотехнологий». Демонстрационные варианты оценочных средств для каждого вида контроля можно посмотреть [http://moodle.pnzgu.ru/pluginfile.php/934114/mod\\_resource/content/0/%D0%A4%D0%9E%D0%A1%20%D0%9C%D0%B0%D1%82%D0%BC%D0%BE%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D0%B8%20%D0%B8%20%D0%BC%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4%D1%8B%20%D0%BD%D0%B0%D0%BD%D0%BE%D1%82%D0%B5%D1%85%D0%BD%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B3%D0%B8%D0%B9.pdf](http://moodle.pnzgu.ru/pluginfile.php/934114/mod_resource/content/0/%D0%A4%D0%9E%D0%A1%20%D0%9C%D0%B0%D1%82%D0%BC%D0%BE%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D0%B8%20%D0%B8%20%D0%BC%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4%D1%8B%20%D0%BD%D0%B0%D0%BD%D0%BE%D1%82%D0%B5%D1%85%D0%BD%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B3%D0%B8%D0%B9.pdf) в разделе дисциплины.

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий»**

### **а) Литература**

1. Головин Ю.И. Основы нанотехнологий . М: Машиностроение, 2012  
<https://e.lanbook.com/reader/book/5793/#2>

2. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем [Электронный ресурс] : учеб. пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 384 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/156>.
3. Головин Ю.И. Введение в нанотехнику <https://e.lanbook.com/reader/book/802/#1>

#### **б) Интернет-ресурсы**

[http://window.edu.ru/catalog/resources?p\\_str=математические+модели+и+методы+нанотехнологий](http://window.edu.ru/catalog/resources?p_str=математические+модели+и+методы+нанотехнологий)

[http://window.edu.ru/catalog/resources?p\\_str=методы+нанотехнологий](http://window.edu.ru/catalog/resources?p_str=методы+нанотехнологий)

#### **в) Программное обеспечение**

1. ПО «Microsoft Windows» (подписка DreamSpark/Microsoft Imagine Standard); регистрационный номер 00037FFEBACF8FD7 Договор № СД-130712001 от 12.07.2013 (подписка с 1 сентября 2013 г. до 31 августа 2017 г.) Продление Microsoft Imagine Standard KDF-00031 (подписка с 1 сентября 2017 г. до 31 августа 2020 г.)

#### **г) Другое материально-техническое обеспечение**

1. Персональные компьютеры

Рабочая программа дисциплины «Математические модели и методы нанотехнологий» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 01.03.04. — «Прикладная математика», утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 10 января 2018 г №13.

Программу составил:

Тында А.Н.  доцент кафедры ВиПМ

**Настоящая программа не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.**

Программа одобрена на заседании кафедры «Высшая и прикладная математика»

Протокол № 11 от «01» 09 2019 года

Зав. кафедрой ВиПМ проф.д.ф.-м.н.

 Бойков И.В.

Программа согласована с заведующим выпускающей кафедрой «Высшая и прикладная математика»

Зав. кафедрой ВиПМ, проф. проф.д.ф.-м.н.

 Бойков И.В.

Программа одобрена методической комиссией ФВТ

Протокол № 10 от «03» 01 2019 года

Председатель методической комиссии ФВТ

к.т.н., доцент

 Глотова Т.В.

**Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и регистрации изменений**

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата )	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой