

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
**«БЕЛГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ им. В.Г. ШУХОВА»**
(БГТУ им. В.Г. Шухова)

УТВЕРЖДАЮ
Директор архитектурно-строительного
института


Уваров В.А.
« 28 »  2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
дисциплины

Компьютерное моделирование наносистем

Направление подготовки:

22.03.01 Материаловедение и технологии материалов

Профиль подготовки:

**Материаловедение и технологии
конструкционных и специальных материалов**

Квалификация

бакалавр

Форма обучения

очная


Институт: архитектурно-строительный


Кафедра: материаловедения и технологии материалов

Белгород – 2016

Рабочая программа составлена на основании требований:

- Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ №1331 от 12 ноября 2015 г.;
- плана учебного процесса БГТУ им. В.Г. Шухова, введенного в действие в 2016 году.

Составитель (составители): к.г.-м.н., доц.  И.В. Жерновский


Рабочая программа согласована с выпускающей кафедрой материаловедения и технологии материалов 

Заведующий кафедрой: д.т.н., проф.  В.В. Строкова

« 19 » сентября 2016 г.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры 

« 19 » сентября 2016 г., протокол № 1

Заведующий кафедрой: д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Рабочая программа одобрена методической комиссией института

« 28 » сентября 2016 г., протокол № 6

Председатель: к.т.н., доц.  А.Ю. Феокистов

1. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Формируемые компетенции			Требования к результатам обучения
№	Код компетенции	Компетенция	
Профессиональные			
1	ПК-10	Способность оценивать качество материалов в производственных условиях на стадии опытно-промышленных испытаний и внедрения	В результате освоения дисциплины обучающийся должен Знать: методы моделирования и прогнозирования технологических процессов и свойств материалов. Уметь: применять методы моделирования при прогнозировании и оптимизации технологических процессов и свойств материалов, стандартизации и сертификации материалов и процессов. Владеть: навыками математической обработки результатов исследований.
	ПК-17	Способность использовать в профессиональной деятельности основы проектирования технологических процессов, разработки технологической документации, расчетов и конструирования деталей, в том числе с использованием стандартных программных средств.	В результате освоения дисциплины обучающийся должен Знать: основные принципы и приемы компьютерного моделирования структуры материалов. Уметь: создавать алгоритмы для компьютерного проектирования структуры материалов. Владеть: методами моделирования наноструктурированных материалов с применением стандартных программных средств.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Содержание дисциплины основывается и является логическим продолжением следующих дисциплин:

№	Наименование дисциплины (модуля)
1	Основы нанотехнологий
2	Компьютерная графика

Содержание дисциплины служит основой для изучения следующих дисциплин:

№	Наименование дисциплины (модуля)
---	----------------------------------

1	Проектирование и производство изделий из композиционных материалов
2	Научно-исследовательская работа
3	Коммерциализация и трансфер результатов инновационной деятельности

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зач. единиц, 180 часов.

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр № 7
Общая трудоемкость дисциплины, час	180	180
Контактная работа (аудиторные занятия), в т.ч.:	51	51
лекции	34	34
лабораторные		
практические	17	17
Самостоятельная работа студентов, в том числе:	129	129
Курсовой проект		
Курсовая работа	36	36
Расчетно-графическое задание		
Индивидуальное домашнее задание		
<i>Другие виды самостоятельной работы</i>	57	57
Форма промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	36	36

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Наименование тем, их содержание и объем Курс 4 Семестр 7

№ п/п	Тема лекции (краткое содержание лекции)	К-во лекционных часов	Объем на тематический раздел, час		
			Практические и др. занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	2	3	4	5	6
1. Моделирование как метод познания					
1	Введение. Цель и задачи дисциплины.	2			2
2	Основные понятия математического моделирования.	3			3
3	Компьютерное моделирование.	2	2		4
4	Разработка математических	2			2

	моделей.				
2. Имитационные и численные модели. Эмпирические модели.					
5	Основные понятия имитационного моделирования.	2			2
6	Основные понятия эмпирического моделирования.	2			2
3. Примеры практического использования математических моделей в наносистемном материаловедении.					
7	Компьютерное моделирование для графической визуализации строения наноструктурных объектов.	3	3		6
8	Разработка алгоритма вычисления координат атомов фуллерена C_{60} с использованием полиэдральных представлений.	3	3		8
9	Математические модели и алгоритмы современных методов структурного анализа мелкодисперсных поликомпонентных систем в применении к количественному рентгенофазовому анализу.	3			3
10	Программные средства для симуляционного построения теоретических порошковых рентгенограмм и полнопрофильного анализа.	3	6		11
4. Моделирование организации наносистемных объектов.					
11	Геометрические принципы организации наноструктурных объектов. Фракталы. Программные средства, реализующие фрактальные построения.	3			3
12	Краткое описание скритового языка программы IFS Builder 3d.	3	3		8
5. Перспективные направления в компьютерном моделировании наносистем в строительном материаловедении.					
13	Заключительная лекция – обзор некоторых материалов отечественных и зарубежных публикаций.	3			3
	ВСЕГО	34	17		57

4.2. Содержание практических (семинарских) занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тема практического (семинарского) занятия	К-во часов	К-во часов СРС
Семестр №6				
1	Компьютерное моделирование.	Создание мультимедийных презентаций с использованием MICROSOFT POWERPOINT.	2	2
2	Компьютерное моделирование для графической визуализации строения наноструктурных объектов.	Разработка алгоритма вычисления координат атомов фуллерена C ₆₀ с использованием полиэдральных представлений.	3	3
3	Разработка алгоритма вычисления координат атомов фуллерена C ₆₀ с использованием полиэдральных представлений.	Компьютерное моделирование для графической визуализации строения наноструктурных объектов. Компьютерное моделирование формы молекулы фуллерена C ₆₀ с использованием программы POVRAY.	3	3
4	Программные средства для симуляционного построения теоретических порошковых рентгенограмм и полнопрофильного анализа.	Математические модели и алгоритмы современных методов структурного анализа мелкодисперсных поликомпонентных систем в применении к количественному рентгенофазовому анализу. Освоение пользовательского интерфейса программ PowderCell. Изучение структуры файлов исходных данных различных форматов. Набор данных и подготовка файлов данных *.cel. Симуляционный расчет дифракционных профилей порошковых рентгенограмм цементных минералов.	3	3
5	Программные средства для симуляционного построения теоретических порошковых рентгенограмм и полнопрофильного анализа.	Практическое применение полнопрофильного метода к количественному рентгенофазовому анализу сложных поликомпонентных мелкодисперсных смесей с использованием программ PowderCell.	3	3
6	Геометрические принципы организации наноструктурных объектов. Фрактали. Программные средства, реализующие фрактальные построения.	Программное построение модельных фрактальных объектов с применением программы IFS Builder 3d.	3	3

	Краткое описание скриптового языка программы IFS Builder 3d.			
ИТОГО:			17	17

4.3. Содержание лабораторных занятий

Учебным планом не предусмотрены

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Перечень контрольных вопросов (типовых заданий)

№ п/п	Наименование разделов дисциплины	Наименование вопросов
1		2
1	Введение. Цель и задачи дисциплины.	Свойства и особенности феноменологической модели (по Р.Пайерлсу).
2		Структура файлов исходных данных программы PowderCell (*.cel).
3		Канторово множество. Размерность по Хаусдорфу.
4		Аппаратурные, структурные и профильные параметры в моделировании порошковой рентгенограммы.
5		Геометрические фрактальные объекты (салфетка и ковер Серпинского, фрактальные кривые).
6		Способы исследования математических моделей.
7	Основные понятия математического моделирования.	Правила формирования (написания) символа класса (группы) симметрии в международной нотации (символы Германа-Могена).
8		Понятие о правильных многогранниках (телах Платона). Топологическое соответствие формы молекулы C_{60} выпуклой комбинации икосаэдра и додекаэдра.
9		Управляющие конструкции скриптового языка программы IFS Builder 3d.
10		Модель – приближение (по Р.Пайерлсу).
11		Размерность подобия и самоподобия.
12	Компьютерное моделирование.	Общее выражение для интенсивности рассеяния рентгеновских лучей поликристаллическим (порошковым) образцом как основа Ритвельдовского алгоритма.
13	Разработка математических моделей.	Программа IFS Builder 3d. Назначение и возможности.
14		Имитационное, численное моделирование. Основные понятия и особенности.
15		Графическое моделирование. Визуализация сложных объектов.
16		Требования, предъявляемые к математическим моделям.
17		Модель – аналогия (по Р.Пайерлсу).

18		Сущность и задачи численного моделирования.
19	Основные понятия эмпирического моделирования.	Блок-схема алгоритма для численного расчета и построения произвольного выпуклого многогранника.
20		Модель. Моделирование. Виды моделей.
21		Стратегия Ритвельдовского уточнения аппаратурных, структурных и профильных параметров.
22		Общее представление о фракталах. Дробная размерность.
23		Модель – упрощение (по Р.Пайерлсу).
24		Полнопрофильный подход к количественному рентгенофазовому анализу.
25		Сущность и задачи метода имитационного моделирования.
26	Компьютерное моделирование для графической визуализации строения наноструктурных объектов.	Метод и математический алгоритм полнопрофильного анализа порошковой рентгенограммы (метод Ритвельда).
27		Этапы построения математической модели.
28		Классы симметрии кристаллических многогранников и кристаллической решетки.
29		Эвристическая модель (по Р.Пайерлсу).
30	Разработка алгоритма вычисления координат атомов фуллерена C_{60} с использованием полиэдральных представлений.	Профильный, брэгговский и структурный факторы соответствия как критерий адекватного описания порошкового поликомпонентного вещества полнопрофильной моделью.
31	Математические модели и алгоритмы современных методов структурного анализа мелкодисперсных поликомпонентных систем в применении к количественному рентгенофазовому анализу.	Достоинства и недостатки метода имитационного моделирования.
32		Основные характеристики программ PowderCell, FullProf, Rietica.
33		Мысленный эксперимент (по Р.Пайерлсу).
34		Методы построения математических зависимостей по экспериментальным данным.

5.2. Перечень тем курсовых проектов, курсовых работ, их краткое содержание и объем.

- Проведение количественного рентгенофазового анализа цементного клинкера методом Ритвельда и использованием программы PowderCell.
- Анализ фрактальной размерности двумерных плоских кластеров рассчитанных при помощи программы IFS Builder 3d.
- Разработка и реализация в программной среде пакета Mathematica алгоритма для вычисления площадей граней произвольных выпуклых многогранников.
- Определение концентрации аморфной фазы в поликомпонентной смеси полнопрофильным методом при помощи программы Rietica.
- Поиск оптимальной модели минерального состава поликомпонентных смесей со сложными наложениями дифракционных отражений для полнопрофильного анализа на примере портландцемента.
- Сравнение аппроксимационного и Фурье метода для оценки истинного уширения дифракционных профилей в задаче определения размеров ультра- и нанодисперсных частиц.
- Моделирование дифракционных профилей глинистых минералов с различной степенью их дисперсности.

- Использование ритвельдовского метода для определения размеров нанокристаллитов в скрытокристаллических веществах.
- Расчет зависимостей величины нескомпенсированного заряда (поверхностной активности) от формы и размеров микро – и наночастиц кварца.
- Разработка и реализация (в любой программной среде) алгоритма для графического 3D-построения икосаэдрического кластера с произвольным числом слоев.

Курсовая работа (КР) это самостоятельная работа студента, которая выполняется по заданию преподавателя. Она имеет описательный характер и предполагает создание краткого научно-исторического обзора с целью показать способность использовать полученные в курсе «Компьютерное моделирование наносистем» знания, умение работать с литературой и с программными средствами для реализации поставленной задачи. Студент должен кратко и четко изложить в пояснительной записке полученные результаты.

Расчетно-пояснительная записка по КР должна включать:

- титульный лист,
- задание на ИДЗ,
- основной раздел,
- заключение (выводы),
- список использованной литературы.
- приложения (при необходимости).

Перечень конкретных вопросов, которые должны быть отражены в основном разделе КР, определяется преподавателем. Изложение материала основного раздела должно быть достаточно детальным, чтобы была возможность провести проверку результатов.

Заключение по работе должно содержать перечень и оценку результатов выполнения квалификационной работы и степени их соответствия требованиям задания. В приложения следует включать вспомогательный материал, необходимый, по мнению автора, для лучшего понимания изложенного материала, который, однако, загромождает текст основного раздела. Например, вывод используемого в КР графического иллюстративного материала и т.п.

Общий рекомендуемый объем расчетно-пояснительной записки по КР с приложениями составляет 10 - 15 страниц.

5.3. Перечень индивидуальных домашних заданий, расчетно-графических заданий.

Учебным планом не предусмотрены

5.4. Перечень контрольных работ.

Учебным планом не предусмотрены

6.ОСНОВНАЯ И ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

6.1. Перечень основной литературы

1. Бусленко М.П. Моделирование сложных систем. – М.: Наука, 1978. – 362 с.
2. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 320 с.
3. Вознесенский В.А. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ: Учебник / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Б.Л. Огарков; Под ред. В.А. Вознесенского. – Киев: Выща шк. Головное изд-во, 1989. – 328 с.

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации

8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений

Рабочая программа без изменений утверждена на 2016/2017 учебный год.

Протокол № 6 заседания кафедры от «18» мая 2016 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров

8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений

Рабочая программа без изменений утверждена на 2017/2018 учебный год.

Протокол № 5 заседания кафедры от «23» мая 2017 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров

8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений

Рабочая программа без изменений утверждена на 2018/2019 учебный год.

Протокол № 6 заседания кафедры от «07» мая 2018 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров

8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений

Рабочая программа без изменений утверждена на 2019/2020 учебный год.

Протокол № 5 заседания кафедры от «30» мая 2019 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров

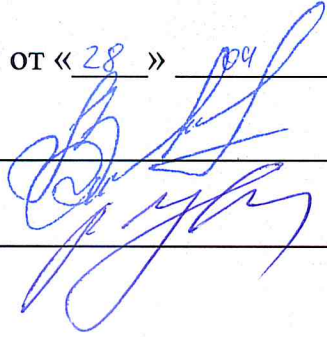
8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Утверждение рабочей программы без изменений

Рабочая программа без изменений утверждена на 2020/2021 учебный год.

Протокол № 3 заседания кафедры от « 28 » 04 2020 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров

8. УТВЕРЖДЕНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

Рабочая программа утверждена на 2021/2022 учебный год
без изменений / с изменениями, дополнениями

Протокол № 4 заседания кафедры от « 12 » апреля 2021 г.

Заведующий кафедрой д.т.н., проф.  В.В. Строкова

Директор института д.т.н., проф.  В.А. Уваров