

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Донецкий государственный университет»

Физико-технический факультет
Кафедра теоретической физики и нанотехнологий

УТВЕРЖДАЮ
проректор

_____ П. А. Машаров
«17» апреля 2025 г.
МП

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Укрупненная группа направлений подготовки	28.00.00 Нанотехнологии и наноматериалы
Программа высшего образования	Программа магистратуры
Направление подготовки	28.04.03 Наноматериалы
Направленность (профиль) образовательной программы	Наноматериалы и нанотехнологии
Квалификация	Магистр
Форма обучения	Очная

Рабочая программа может быть адаптирована для лиц
с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Донецк 2025

Рабочая программа дисциплины **«Теоретическое и компьютерное моделирование»** для обучающихся по направлению подготовки 28.04.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы и нанотехнологии), составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – магистратура по направлению подготовки 28.04.03 Наноматериалы, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22 сентября 2017 г. № 966 (с изм. и доп.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 06 апреля 2021 г. № 245 (с изм. и доп.), в соответствии с учебным планом, утвержденным Ученым советом ФГБОУ ВО «ДонГУ» для набора 2025 года.

Разработчик:

доцент кафедры теоретической
физики и нанотехнологий,
канд. физ.-мат. наук

В.И. Фиохин

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры теоретической физики и нанотехнологий.

Протокол от 10.04.2025 г. № 18.

Заведующий кафедрой

А. Г. Петренко

СОГЛАСОВАНО:

И.о. декана физико-технического факультета
16.04.2025 г.

С. А. Фоменко

Учебно-методическая комиссия физико-технического факультета.

Протокол от 16.04.2025 г. № 4

Председатель

В. Н. Котенко

Руководитель основной образовательной
программы, д-р физ.-мат. наук, проф.
10.04.2025 г.

А. Г. Петренко

1. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

1.1. Требования к предварительной подготовке обучающихся, предшествующие и сопутствующие дисциплины, на которых основывается изучение данной:

дисциплины программы бакалавриата: Моделирование микро- и нано структур, Физика гетероэпитаксиальных наноструктур, Материалы и методы нанотехнологий.

1.2. Дисциплины, курсовые работы и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее:

Современные методы анализа и исследования структуры и свойств наноматериалов, Современные функциональные материалы, Процессы получения наночастиц и наноматериалов, Производственная практика: научно-исследовательская работа.

2. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1. Общая характеристика

Наименование показателя	Значение показателя
Название образовательной программы (далее – ОП)	28.04.03 Наноматериалы (Профиль: Наноматериалы и нанотехнологии)
Шифр и название в соответствии с учебным планом	Б1.В.ОД.4 Теоретическое и компьютерное моделирование
Часть образовательной программы	Вариативная часть: выбор вуза
Количество зачетных единиц / всего часов	5 / 180

В случае предъявления от обучающегося или его родителя (законного представителя) заявления на обучение по адаптированной образовательной программе высшего образования, подкрепленного заключением психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК) или медико-социальной экспертизы (МСЭ) с рекомендациями создания индивидуальной программы реабилитации и абилитации (ИПРА), данная рабочая программа может быть адаптирована с учетом индивидуальных особенностей здоровья обучающегося.

2.2. Распределение часов по формам и периодам обучения

Форма обучения	курс	семестр	Общее количество часов					Форма контроля
			лекционных	лабораторных	практических	самостоятельной работы + контроль	всего	
Очная	1	1	17	-	17	146	180	зачет

3. ЦЕЛИ ДИСЦИПЛИНЫ

Приобретение теоретических знаний, позволяющих использовать компьютерные технологии в сфере моделирования физических процессов; овладение методами и приёмами компьютерного моделирования физических процессов, включающего построение и анализ математической модели, разработку вычислительных алгоритмов и программного обеспечения для компьютерной реализации модели, проведение вычислительного эксперимента, применительно к исследованию физических объектов и связанных с ними процессов и явлений.

**4. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ
ОСВОЕНИЯ КОМПОНЕНТА ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ, ИХ ИНДИКАТОРЫ
И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ**

Компетенции	Индикаторы	Результаты обучения
ПК-3. Способен планировать разработку и внедрение новых технологических процессов	ПК-3.3. Разрабатывает компьютерные модели исследуемых процессов и систем	ПК-3.3.1. Знает основные понятия теории математического моделирования, классификацию моделей и области их использования, задачи моделирования. ПК-3.3.2. Умеет выполнять анализ исследуемой системы или процесса, обоснованно выбирать метод моделирования. ПК-3.3.3. Владеет методами и приемами работы в системах моделирования, основными критериями оценки полученных результатов моделирования.
	ПК-3.4. Использует математические модели физических систем для изучения и прогнозирования их свойств	ПК-3.4.1. Знает основные средства моделирования, применяемые в процессе проектирования систем на разных стадиях детализации проекта, методы моделирования и анализа систем, принципы построения моделей. ПК-3.4.2. Умеет строить адекватную модель системы или процесса с использованием современных компьютерных средств, интерпретировать и анализировать результаты моделирования. ПК-3.4.3. Владеет опытом использования в ходе осуществления моделирования научно-технической информации, Internet-ресурсов, баз данных и каталогов, электронных журналов и патентов, поисковых ресурсов и др.

5. ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Название темы	Краткое содержание темы (вопросы темы)
Раздел 1. Теоретическое и компьютерное моделирование	
Теоретические основы моделирования.	Понятия модель и моделирование. Функции моделей. Актуальность моделирования и множественность моделей. Виды моделей
Системный подход в моделировании.	Принципы системного подхода. Понятие системы. Взаимодействие системы и окружающей среды. Системный подход в моделировании.
Компьютерное моделирование.	Компьютерное моделирование. Пакеты моделирования. Математические модели и математическое моделирование. Построение математических моделей. Виды математических моделей.
Моделирование процессов и систем	Виды систем. Свойства систем. Моделирование систем. Понятие процесса. Построение моделей систем и процессов.

Имитационное моделирование	Понятие имитационного моделирования. Актуальность имитационного моделирования систем. Виды имитационного моделирования. Вычислительный эксперимент
Моделирование систем с распределенными параметрами	Описание процессов в распределенных системах. Модели процессов переноса, теплопроводности, волновых процессов. Методы моделирования систем с распределенными параметрами
Графическое моделирование 3D объектов и систем.	Построение моделей по 3D операциям. Построение моделей 3D систем

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Форма обучения – очная, курс – 1, семестр – 1

Наименования разделов и тем	Количество часов				
	Лекц.	Лабор.	Практ.	СРС+К	Всего
Раздел 1. Теоретическое и компьютерное моделирование	17		17	146	180
Теоретические основы моделирования.	2		2	20	24
Системный подход в моделировании.	2		2	21	25
Компьютерное моделирование.	2		2	21	25
Моделирование процессов и систем	2		2	21	25
Имитационное моделирование	3		3	21	27
Моделирование систем с распределенными параметрами	3		3	21	27
Графическое моделирование 3D объектов и систем.	3		3	21	27
ИТОГО ПО КОМПОНЕНТУ ОПОП	17		17	146	180

7. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (СРЕДСТВА) ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

7.1. Контрольные вопросы

Раздел 1

1. Понятие модели физического процесса в области физики конденсированного состояния.
2. Классификация физико-математических моделей объектов и процессов физики конденсированного состояния.
3. Цели, задачи и возможности математического моделирования.
4. Основные положения системного подхода в моделировании.
5. Основные понятия теории систем.
6. Особенности математического и имитационного моделирования.
7. Особенности имитационного моделирования.
8. Способы моделирования случайных событий.
9. Программные комплексы моделирования.
10. Средства автоматизации разработки моделей систем.
11. Математические методы анализа процесса образования и роста наноструктур.
12. Моделирование молекулярных и кластерных систем. Фрактальные модели.
13. Самоподобие. Вычисление фрактальной размерности.
14. Моделирование фракталов. Снежинка Коха и ковер Серпинского.

15. Понятие рекурсии. Применение в моделировании.
16. Алгоритмы построения фрактальных множеств Мандельброта и Жюлиа.
17. Моделирование углеродных нанотрубок.
18. Методы молекулярной динамики в моделировании кластерных систем и нанообъектов.
19. Применение в моделировании кинетических методов Монте-Карло.
20. Основные модели взаимодействия частиц с поверхностью.
21. Имитация роста шероховатых поверхностей. Основные типы моделей.
22. Случайное осаждение частиц на поверхность.
23. Осаждение частиц с поверхностной релаксацией.
24. Баллистическое осаждение частиц на поверхность.
25. Компьютерная реализация моделирования наносистем и нанотехнологий.
26. Типовые программные продукты и графические библиотеки для моделирования процессов нанотехнологий.
27. Теория перколяции: моделирование и приложения.
28. Глобулярная и капиллярная модели пористой среды. Модель пор между круглыми стержнями.
29. Физические характеристики пористого наноматериала. Модельный расчет.
30. Генератор случайных чисел. Стохастическая модель пористого материала.
31. Вычисление порога перколяции при моделировании перколяционного процесса оккупации средой дискретной прямоугольной решетки.
32. Моделирование процесса диффузии наночастицы в среде.
33. Модель частицы в клеточном автомате.
34. Алгоритмы одномерной и двумерной диффузии наночастицы в среде.
35. Случайное блуждание и движение броуновской частицы.
36. Классификация типов диффузионного движения.
37. Возможности компьютерного моделирования в приложении к современным нанотехнологиям.

7.2. Темы докладов (рефератов)

1. Функции моделей.
2. Классификации моделей.
3. Виды систем.
4. Пакеты моделирования.
5. Моделирование информационных систем.
6. Моделирование случайных процессов.
7. Модели процессов с распределенными параметрами.
8. Моделирование процесса двухстадийной диффузии.

7.3. Темы письменных работ (типы задач)

Моделирование процессов и систем:

1. Построение моделей непрерывных процессов
2. Построение гибридных моделей
3. Построение моделей дискретных систем
4. Идентификация параметров модели
5. Моделирование систем управления
6. Построение оптимизированных моделей систем
7. Моделирование образовательной системы

Имитационное моделирование:

1. Построение модели «черный ящик»
2. Моделирование дискретных и непрерывных случайных процессов
3. Построение модели «клеточный автомат»

4. Моделирование случайных событий

Моделирование систем с распределенными параметрами:

1. Моделирование переноса

2. Моделирование теплопроводности

3. Моделирование диффузии

В случае ведения учебного процесса с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий, содержание билета может отличаться от приведенного.

8. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ, КОТОРЫЕ ПОЛУЧАЮТ ОБУЧАЮЩИЕСЯ

Общая оценка знаний обучающихся по дисциплине проводится по 100-балльной шкале исходя из максимума, приведенного в таблице ниже.

Организационно-учебная работа в аудитории оценивается на основе таких критериев как посещаемость занятий, своевременное и качественное выполнение домашних заданий, активность во время проведения лекционных и практических занятий (участие в обсуждении текущего и пройденного материала, решение задач и т.п.).

Самостоятельная работа оценивается на основе предоставленных на проверку выполненных домашних, индивидуальных заданий с учетом своевременности их предоставления и соответствия требованиям к их выполнению.

Количество баллов за контрольную работу вычисляется как сумма баллов за все входящие в её состав задания. Каждое задание оценивается исходя из максимально возможного количества баллов с учетом правильности выполнения задания, полноты приводимых обоснований.

По результатам работы в семестре обучающийся, набравший не менее 60 баллов, имеет право получить оценку. Те, кто претендует на более высокий балл, проходят промежуточную аттестацию. Максимальное количество баллов на промежуточной аттестации – 100. Общее количество баллов за семестр вычисляется как максимальная из полученных за семестр и на промежуточной аттестации и выставляется согласно принятому порядку.

8.1. Семестр 1

Номера разделов	Виды работ	Максимальное количество баллов
1	Организационно-учебная работа в аудитории	20
	Самостоятельная работа	10
	Контрольные работы по практике	10
	Контрольная работа по теоретическому материалу	20
ИТОГО		60
Промежуточная аттестация (зачет)		40
Общий итог за семестр		100

Соответствие баллов оценке

Количество баллов из 100	ECTS	Оценка по пятибалльной шкале	
		Экзамен, дифференцированный зачет	Зачет
90-100	A	отлично	зачтено
80-89	B	хорошо	зачтено

75-79	C	удовлетворительно	зачтено
70-74	D		зачтено
60-69	E		зачтено
35-59	FX	неудовлетворительно	не зачтено
0-34	F		не зачтено

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Учебные занятия проводятся в 4 учебном корпусе ДонГУ (г. Донецк, пр. Театральный, 13). Для проведения занятий требуется аудитория, оборудованная меловой или маркерной доской, мультимедийный проектор и экран, ноутбук, комплект учебной мебели для студентов, рабочее место преподавателя, выход в Интернет – проводной или с использованием Wi-Fi.

Для самостоятельной работы используются текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета и других электронных библиотечных баз данных, учебно-методическое обеспечение, представленное в учебно-методическом кабинете кафедры теоретической физики и нанотехнологий (ауд. 256).

Обучающиеся имеют возможность использовать учебные материалы по дисциплине, размещенные на платформе Moodle Центра дистанционного образования ФГБОУ ВО «ДонГУ». При изучении дисциплины могут применяться электронное обучение и дистанционные образовательные технологии.

С использованием ресурсов платформы дистанционного образования осуществляется текущий контроль знаний обучающихся на основе тестирования и проверки результатов самостоятельной работы.

10. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

10.1. Основная литература

1. Фиохин В.И. Теоретическое и компьютерное моделирование материалов [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие / В.И.Фиохин – Донецк : ДонГУ, 2020 – Электронные данные (1 файл).
2. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 1 / Х. Гулд, Я. Тобочник; пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М. : Мир, 1990. - 349 с.
3. Компьютерное моделирование в физике : [в 2 ч.]. Ч. 2 / Х. Гулд, Я. Тобочник; пер. с англ. А. Н. Полюдова, В. А. Панченко. - М. : Мир, 1990. - 399.
4. Пытьев Ю. П. Математическое моделирование. Т. 22, № 1. - Москва : Наука, 2013.

10.2. Дополнительная литература

1. Пытьев Ю. П. Моделирование субъективных суждений модельера-исследователя о модели объекта исследования / Ю. П. Пытьев // Математическое моделирование. - Москва, 2013. - Т. 25, № 4. - С. 102-125.
2. Методы математического моделирования и вычислительной диагностики : сб. тр. фак. вычисл. математики и кибернетики МГУ / Под ред. А. Н. Тихонова, А. А. Самарского. - М. : Изд-во МГУ, 1990. - 300 с.
3. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман ; пер. с англ. В. Н. Задкова ; под ред. С. А. Ахманова. - М. : Наука, 1990. - 175 с.

11. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

1. **Национальная электронная библиотека (НЭБ):** федеральная государственная информационная система / Министерство Культуры РФ; Российская государственная библиотека. – Москва, 2019- . – URL: <https://rusneb.ru/> (дата обращения:

31.03.2025). – Режим доступа: свободный, подписка. Необходима установка программного обеспечения. – Текст: электронный.

2. **eLIBRARY.RU**: научная электронная библиотека: сайт. – Москва, 2000- . – URL: <https://elibrary.ru> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

3. Научная электронная библиотека «**КиберЛенинка**»: сайт / Ассоциация «Открытая наука». – Москва, 2014- . – URL: <https://cyberleninka.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

4. Электронно-библиотечная система «**Лань**»: [сайт]. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания Сетевой электронной библиотеки, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

5. **ЭБС Юрайт**: электронная библиотечная система: сайт. – Москва, 2013. – URL: <https://urait.ru/library/svobodnyy-dostup/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: издания свободного доступа, для авторизов. пользователей. – Текст: электронный.

6. **Электронно-библиотечная система ДонГУ**: сайт / ФГБОУ ВО «ДонГУ». – Донецк, 2016- . – URL: <http://library.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.

7. **Электронный каталог** Научной библиотеки ДонГУ: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://library.donnu.ru/catalog/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: поиск свободный, электронные документы – для пользователей ДонГУ.

8. **Электронный архив ДонГУ**: раздел сайта / НБ ДонГУ. – Текст: электронный // ЭБС ДонГУ: сайт. – URL: <http://repo.donnu.ru/> (дата обращения: 31.03.2025). – Режим доступа: свободный.

12. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонГУ № 46484614)
2. Microsoft Office (корпоративная лицензия ДонГУ № 46472919)
3. Microsoft Visual Studio (лицензия программы Dream Spark для высших учебных заведений)
4. Антивирус Касперского, Adobe Acrobat Reader, xPDF (лицензии GPL, Apache, BSD для свободного программного обеспечения).