

2. Электронное портфолио педагога [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://portfolio.oksns.ru/13143/index.php?option=com\\_content&view=article&id=24:2013-05-06-14-33-42&catid=6:-2&Itemid=8](http://portfolio.oksns.ru/13143/index.php?option=com_content&view=article&id=24:2013-05-06-14-33-42&catid=6:-2&Itemid=8) (дата обращения: 15.01.2016).

УДК 378.146  
УДК [681.54]:[001.895]

**Э. В. Дюльдина, Б. Р. Гельчинский**

**ИНТЕРАКТИВНЫЕ ФОРМЫ РАБОТЫ НА УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЯХ ПО  
КОМПЬЮТЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ НАНОМАТЕРИАЛОВ**

*Дюльдина Эльвира Владимировна*

*e.dyuldina@mail.ru*

*Гельчинский Борис Рафаилович*

*brg47@list.ru*

*ФГБОУ ВПО Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова,  
Россия, г. Магнитогорск,*

*ФГБУ Институт металлургии УрО РАН, Россия, г. Екатеринбург*

**INTERACTIVE FORMS OF WORK IN THE CLASSROOM ON COMPUTER  
SIMULATION OF NANOMATERIALS**

*Dyuldina Elvira Vladimirovna*

*Gelchinski Boris Rafailovich*

*Nosov Magnitogorsk State Technical University, Russia, Magnitogorsk,  
Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia, Ekaterinburg*

**Аннотация.** Создано электронное пособие для обучения в области компьютерного моделирования наноматериалов для бакалавров по направлению 150100 «Металловедение и технология материалов». Предлагаемый вариант ЭОР включает историю и хронологию методов компьютерного моделирования в целом и наноматериалов в частности, определения, методы и примеры моделирования. В теоретической части предусмотрено использование мультимедийных технологий и презентаций. Имеется блок контрольных вопросов, тем рефератов, курсовых работ и заданий, а также информационный блок в виде приложений.

**Abstract.** Created by electronic manual for training in computer modeling of nanomaterials for bachelors in 150100 "Metallurgy and materials technology." The proposed version of the ESM includes the history and chronology of methods of computer modeling in general and nanomaterials in particular, the definitions, methods and simulation examples. The theoretical part provides the use of multimedia technologies and presentations. There is a block of test questions, the essays, coursework and assignments, as well as an information pack in the form of applications.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование; методы; наноматериалы; научно-образовательные основы; электронное пособие.

**Keywords:** computer simulation; methods; nanomaterials; research and educational foundation; electronic manual.

Компьютерное моделирование материалов вообще и наноматериалов в частности – это междисциплинарная область науки и техники, а в образовательной области она тесно связана с материаловедением. Основные области применения компьютеров это: информационные системы и средства коммуникации; автоматизация и управление различными видами человеческой деятельности; математическое моделирование объектов и процессов разнообразной природы. Эти три сферы применения вычислительной техники неразделимы, и их дальнейший синтез неизбежен. Фактически мы всегда в той или иной степени имеем дело со всеми тремя сферами.

Можно утверждать, что на современном этапе научно-технического прогресса математическое моделирование это способ реализации процесса познания и внедрения полученных знаний применительно к конкретному объекту. Поэтому и следует говорить о неизбежности применения вычислительного эксперимента в самых различных областях науки и техники. Опыт показывает, что метод математического моделирования соединяет в себе преимущества традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования, синтезирует знания и усилия ученых различных специальностей, стимулирует фундаментальные исследования, удешевляет и убыстряет НИОКР.

Что такое вычислительный эксперимент? Ядро вычислительного эксперимента составляет триада "модель – алгоритм – программа", а сущность его лучше всего понять на примере задач физики. Для студентов-физиков необходимо дать систематические знания о возможностях и ограничениях при использовании вычислительного эксперимента вообще и в физике конденсированного состояния в частности. Изложить обзор методов и алгоритмов моделирования атомной структуры и физических свойств материалов, таких как методы Монте-Карло и молекулярная динамика и их модификации. Рассмотреть примеры применения этих методов для описания атомной структуры и широкого круга физических свойств веществ в конденсированном состоянии (кристаллы, аморфные материалы, жидкости, плотная плазма). Поскольку методы моделирования требуют знания характера межчастичного взаимодействия в исследуемых системах, необходимо дать обзор способов их расчета, включая энергетические методы и расчеты эффективных Гамильтонианов. Кроме того, следует описать возможности более глубокого анализа данных моделирования путем статистико-геометрического анализа атомной структуры методами многогранников Вороного и симплексов Делоне. Практические занятия по спецкурсу включают обязательно задания для студентов по моделированию ряда микро- и макроскопических свойств и задачи для программирования методов расчета свойств по результатам моделирования.

Многие вузы страны с таким направлением подготовки кадров имеют своего рода «портфолио» образовательных программ в этой области. В МГТУ для студентов-бакалавров по направлению 22.03.01 «Материаловедение и технология материалов» и магистрантов по направлению 03.04.02 «Физика конденсированного состояния» разработаны интерактивные курсы и курсы по выбору с тематикой компьютерного моделирования для построения индивидуальных образовательных траекторий.

Чтобы обеспечить непрерывность профессионального образования «школа-вуз» разработаны элективные курсы «Введение в компьютерное моделирование материалов». Основная идея этих курсов – научить основам компьютерного моделирования материалов с позиции углубленного изучения модулей физического, математического и химического содержания,

имеющих единую дидактическую основу. Как правило, эти курсы в профильных школах читают преподаватели вуза с высокой квалификацией. Для студентов старших курсов добавляется сотрудничество с лабораториями или научно-техническими центрами, где ведутся фундаментальные исследования.

Разработанное электронное учебно-методическое пособие имеет типовую структуру и включает основные системные элементы, объединенные логикой и спецификой дисциплины, которую можно назвать спецкурсом. К ним относится лекционный материал, виртуальный практикум (практикум удаленного доступа), система контроля знаний, самостоятельная работа в виде контрольных, рефератов, курсовых работ. Подготовка бакалавров в первую очередь ориентирована на формирование знаний, причем акцент делается на общепрофессиональные знания. На данный момент имеется бумажный вариант пособия и разрабатывается электронный.

### **Содержание спецкурса «Компьютерное моделирование наноматериалов»:**

#### **Введение**

1. Вычислительные эксперименты в различных областях науки и техники.
2. Возможности компьютерного моделирования в физике конденсированного состояния.
3. Методы моделирования атомной структуры и физических свойств материалов.
  - 3.1 Моделирование методом Монте-Карло.
  - 3.2 Молекулярная динамика.
4. Методы расчета потенциалов для моделирования и численные методы расчета атомной и электронной структуры:
  - вычисления эффективных потенциалов: эмпирические методы, метод псевдопотенциала (модельный и априорный);
  - приближение эффективной среды и метод погруженного атома;
  - метод сильной связи: ЛМТО-рекурсия;
  - статистико-геометрический анализ атомной структуры методами многогранников Вороного и симплексов Делоне.
5. Задания по моделированию и задачи для программирования методов расчета свойств по результатам ММ
6. Темы курсовых работ и рефератов.

Для контроля и самостоятельной работы предусмотрены контрольные вопросы, тестовые задания различного уровня сложности. Во время обучения преподавателями проводятся семинары, коллоквиумы и консультации.

#### **Примерные задания для курсовых работ.**

1. Реализовать алгоритм МД для двумерной системы из 64 частиц
2. Реализовать алгоритм МД для трехмерной системы из 128 частиц
3. Используя программу МД, вычислить ФРР и функцию Ван Хофа.
4. Вычислить коэффициент самодиффузии по данным МД о квадрате смещения.
5. Вычислить коэффициент самодиффузии по автокорреляционной функции скорости методом МД.
6. Моделирование броуновской динамики при постоянной температуре для Леннард-Джонсовой системы.
7. Реализовать алгоритм Метрополиса МК.

8. Реализовать алгоритм возвратного МК.
9. Модель Изинга методом МК.
10. Перколяция методом МК и ее применение для оценки электропроводности, скорости химической реакции и т.п.
11. Рост фрактальных структур, генерированных стохастическим образом.

Теоретическая часть включает пять разделов. Каждый раздел имеет учебный текст, см. пример на рис.1, графические иллюстрации, рисунки и схемы, пример на рис. 2. При обучении используются ресурсы сети Интернет, презентации, видео-ролики.

**Что такое вычислительный эксперимент?**

Ядро вычислительного эксперимента составляет триада "модель - алгоритм - программа", а сущность его лучше всего понять на примере задач физики.

Цикл вычислительного эксперимента можно разбить на несколько этапов:

- выбор физического приближения и математическая формулировка задачи;
- построение физической и соответствующей ей математической модели изучаемого явления или объекта;
- разработка вычислительного алгоритма решения задачи;
- реализация алгоритма в виде программы для ЭВМ;
- проведение расчетов на ЭВМ;
- обработка, анализ и интерпретация результатов расчетов, сопоставление с физическим экспериментом и, в случае необходимости, уточнение или пересмотр математической модели, т. е. возвращение к первому этапу и повторение цикла вычислительного эксперимента.

Рисунок 1 – Фрагмент учебного текста из презентации

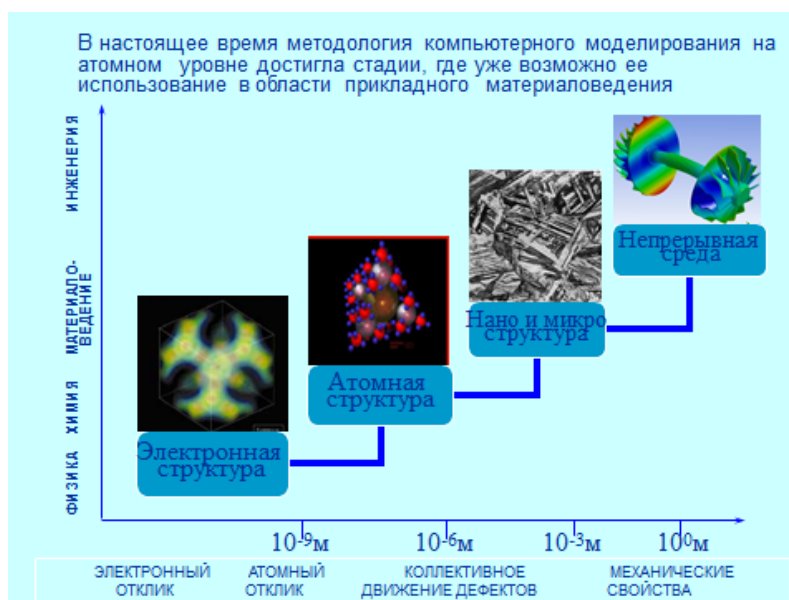


Рисунок 2 – Фрагмент демонстрационных материалов

Разработанное электронное пособие значительно расширяет кругозор знаний школьников и студентов, способствует их самостоятельной работе, преемственности знаний в области науки от школы к вузу и их связи с современным образованием.

### **Список литературы**

1. *Кобаяси, Н.* Введение в нанотехнологию [Текст] / Н. Кобаяси. — Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2005. — 134 с.
2. *Ратнер, М.* Нанотехнология: простое объяснение очередной гениальной идеи [Текст] / М. Ратнер, Д. Ратнер. — Москва: Вальямс, 2005. — 240 с.
3. *Гусев, А.И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии [Текст] / А.И. Гусев. — Москва: Физматлит, 2009. — 416 с.
4. *Андриевский, Р.А.* Наноструктурные материалы [Текст] / Р.А. Андриевский, Ф.В. Рагуля. — Москва: Академия, 2005. — 187 с.
5. *Суздаев, И.П.* Нанотехнология. Физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст] / И.П. Суздаев. — Москва: Комкнига, 2006. — 426 с.
6. *Пул, Ч.* Нанотехнологии [Текст] / Ч. Пул, Ф. Оуэнс. — Москва: Техносфера, 2006. — 328 с.
7. *Хартман, У.* Очарование нанотехнологии [Текст] / У. Хартман. — Москва: Бином. Лаборатория знаний, 2008. — 173 с.
8. *Рыбалкина, М.А.* Нанотехнологии для всех [Текст] / М.А. Рыбалкина. — М.: Nanotechnology NewsNetwork, 2005. — 444 с.
9. *Мелихов, И.В.* Направления развития нанохимии / И.В. Мелихов [Электронный ресурс] // Сетевая библиотека МИФИ. — 2010. — Режим доступа: <http://www.library.mephi.ru> (дата обращения: 11.10.2011).
10. *Гудилин, Е.А.* Лекция из цикла «Мир нанотехнологий» / Е.А. Гудилин [Электронный ресурс] // Что такое «нано»? — 2015. — Режим доступа: <http://www.nanonewsnet.ru/help/video/binom/gudilin> (дата обращения: 11.10.2015).

УДК [378.016 : 62-83] : 378.169

**А. М. Зюзев, Р. М. Юнусов, В. В. Ипполитов, Н. В. Шайхадарова**  
**СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АППАРАТНО-  
ПРОГРАММНЫХ СИМУЛЯТОРОВ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ В  
УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ**

*Зюзев Анатолий Михайлович*

*a.m.zuzev@urfu.ru*

*Юнусов Рустам Мингайсинович*

*ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина», Россия, г. Екатеринбург*

*Ипполитов Владимир Владимирович*

*Шайхадарова Надежда Владимировна*

*kaf.eap@yandex.ru*

*ФГАОУ ВПО «Российский государственный профессионально-педагогический  
университет», Россия, г. Екатеринбург*

**STATE AND PROSPECTS USING HARDWARE-SOFTWARE SIMULATOR  
ELECTRICAL COMPLEX IN EDUCATIONAL PROCESS**

*Zyuzev Anatoliy Mihailovich*

*Yunusov Rustam Mingaysinovich*