



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП

(подпись)

Штарев Д. С.

(Ф.И.О.)



УТВЕРЖДАЮ
Директор департамента

(подпись)

Тананаев И.Г.

(Ф.И.О.)

« 19 » декабря 2021 г.

□

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами
Направление подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов
Программа магистратуры «Цифровое материаловедение (совместно с МИСИС)»
Форма подготовки очная

курс 2 семестр 3
лекции 32 час.
практические занятия 18 час.
всего часов аудиторной нагрузки 50 час.
самостоятельная работа 130 час.
В том числе на подготовку к экзамену 27 час
зачет не предусмотрен
экзамен 3 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 24 апреля 2018 г. № 306.

Рабочая программа обсуждена на заседании Департамент ядерных технологий
протокол № 3 от « 19 » декабря 2021 г.

Директор департамента Тананаев И.Г.

Составитель: к.ф.-м.н., Штарёв Д.С.

Владивосток

2022

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента ядерных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий департаментом _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента ядерных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий департаментом _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента ядерных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий департаментом _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента ядерных технологий:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий департаментом _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

I Цели и задачи освоения дисциплины

Цель: освоение современных методов и способов применения компьютерных методов к разработке новых материалов с заданными свойствами.

Задачи:

- изучить современные методы прогнозирования свойств новых материалов;
- изучить инструментальные средства компьютерного моделирования новых материалов;
- получить практические навыки применения современных программных средств для дизайна новых материалов с заданными свойствами.

Для успешного изучения дисциплины «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами» у обучающихся должны быть сформированы предварительные универсальные компетенции выпускников бакалавриата естественнонаучных и инженерных направлений подготовки.

Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

| Тип задач | Код и наименование профессиональной компетенции (результат освоения) | Код и наименование индикатора достижения компетенции |
|--------------------------|--|--|
| научно-исследовательский | ПК-3 Способен осуществлять анализ новых технологий производства материалов и разрабатывать рекомендации по составу и способам обработки конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | ПК-3.1 Разрабатывает рекомендации по составу и способам обработки конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности |
| технологический | ПК-4 Способен моделировать процессы получения материалов, их обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в | ПК-4.2 Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования |

| Тип задач | Код и наименование профессиональной компетенции (результат освоения) | Код и наименование индикатора достижения компетенции |
|-------------------------------|---|--|
| | том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования |
| организационно-управленческий | ПК-6 Способен генерировать и формулировать оригинальные идеи в специализированных областях науки, техники и технологий, планировать разработку нового материала и осуществлять обоснованный выбор технологического оборудования | ПК-6.1 Осуществляет разработку нового материала с учетом обоснованного выбора технологического оборудования |

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине) |
|--|--|
| ПК-3.1 Разрабатывает рекомендации по составу и способам обработки конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает способы обработки материалов с целью повышения их конкурентоспособности |
| | Умеет правильно подбирать режимы обработки материалов для повышения их конкурентоспособности |
| | Владет навыками применения выбранных методов к решению научных задач |
| ПК-4.2 Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с | Знает стандартные пакеты компьютерных программ |
| | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ |

| | |
|--|--|
| использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач |
| ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Знает стандартные пакеты компьютерных программ |
| | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ |
| ПК-6.1 Осуществляет разработку нового материала с учетом обоснованного выбора технологического оборудования | Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач |
| | Знает современные методы моделирования свойств материалов |
| | Умеет ставить задачи для компьютерного поиска новых материалов |
| | Владеет навыками прогнозирования и оптимизации свойств материалов |

II Трудоемкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачётных единиц (180 академических часов).

(1 зачетная единица соответствует 36 академическим часам)

Видами учебных занятий и работы обучающегося по дисциплине могут являться:

| Обозначение | Виды учебных занятий и работы обучающегося |
|-------------|---|
| Лек | Лекции |
| Пр | Практика |
| СР | Самостоятельная работа обучающегося в период теоретического обучения |
| Контроль | Самостоятельная работа обучающегося и контактная работа обучающегося с преподавателем в период промежуточной аттестации |

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная

| № | Наименование раздела дисциплины | Семестр | Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося | | | | | Формы промежуточной аттестации | |
|---|---|---------|---|-----|----|----|-----|--------------------------------|----------|
| | | | Лек | Лаб | Пр | ОК | СР | | Контроль |
| 1 | Раздел I. Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами | 3 | 32 | | 18 | | 103 | 27 | Экзамен |
| | Итого: | | 32 | | 18 | | 103 | 27 | |

III СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Тема 1. 4 часа. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур: Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур; история и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования; достижения современной науки; история развития компьютеров и электронных устройств; языки программирования для моделирования материалов и их развитие; преимущества и недостатки компьютерного моделирования; основные возможности и отличие от традиционного эксперимента.

Тема 2. 4 часа. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации: Высокопроизводительные расчеты: аппаратная и программная компоненты, методы проведения высокопроизводительных расчетов; принципы передачи и обработки информации между сервером и клиентом; основные этапы проведения высокопроизводительных расчетов; основные принципы работы на суперкомпьютерах и вычислительных кластерах; расчет времени моделирования и объема затрачиваемых ресурсов; оптимизация расчетов.

Тема 3. 4 часа. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока. Основные методы компьютерного моделирования и область их применения. Моделирование динамики атомов и молекул. Методы получения информации о межатомных взаимодействиях. Метод квантово-механических расчетов. Основные этапы моделирования методом ab-initio расчетов. Ограничения метода. Вычислительные пакеты. Входные и выходные параметры расчетов.

Тема 4. 4 часа. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока. Особенности применения методы Хартри-Фока и возможности метода. Электронное строение системы. Стационарное уравнение Шредингера и её решение для случая электронов. Используемые упрощения. Выбор волновой функции. Одноэлектронное приближение. Приближение Хартри-Фока.

Тема 5. 4 часа. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности. Многоэлектронные системы и методы их изучения. Системы с несколькими степенями свободы. Проведение расчетов на примере молекулы водорода. Метод функционала плотности. Конечные температуры. Функционал плотности для нестационарных систем. Функционал плотности в теории сверхпроводимости.

Тема 6. 4 часа. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства. Конструирование эффективных потенциалов межатомного взаимодействия. Параметризация потенциалов взаимодействия. Фазовая стабильность. Электрические свойства. Магнитные свойства. Разработка потенциалов ЕАМ-типа для металлов. Метод погруженного атома. Разработка многочастичных потенциалов и дизайн новых материалов.

Тема 7. 4 часа. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры. Предсказание оптических свойств материала на основе данных квантово-механических расчетов. Оптические свойства. Транспортные характеристики. Процесс транспорта электронов. Расчет электронной структуры атомов однокомпонентных металлов. Расчет энергии взаимодействия атомов/молекул. Расчет энергии связи частиц и восстановление потенциала взаимодействия.

Тема 8. 4 часа. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость. Минимизация ошибок и оптимизация расчетов. Выбор критериев оценки точности. Определение точности. Определение ресурсоемкости при выполнении ab-initio расчетов. Определение абсолютной и относительной погрешностей расчетов. Использование приближений.

IV СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Практическая часть курса и самостоятельная работа обучающихся являются дополняющими друг друга видами деятельности по освоению дисциплины «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами». Самостоятельная работа включает в себя предварительную индивидуальную и/или групповую подготовку теоретических основ практических заданий. Практическая часть заключается в решении и последующем анализе задач, поставленных перед обучающимися, на практических занятиях при сопровождении преподавателя.

Практические занятия (18 час.) и самостоятельная работа (103 час.)

Тема 1. Практическое занятие (2 час.), Самостоятельная работа (11 час.). Метод молекулярной динамики. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов.

Тема 2. Практическое занятие (2 час.), Самостоятельная работа (11 час.). Моделирование динамики атомов и молекул. Основные этапы моделирования: теоретические основы, уравнения движения, интегрирование уравнений движения, краевые условия. Метод молекулярной динамики в дизайне новых материалов.

Тема 3. Практическое занятие (2 час.), Самостоятельная работа (11 час.). Статистическое моделирование. Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы.

Тема 4. Практическое занятие (4 час.), Самостоятельная работа (20 час.) Метод моделирования Монте-Карло. Методы ускорения расчетов на основе метода Монте-Карло. Обратный метод моделирования Монте-Карло. Виды методов моделирования Монте-Карло. Определение начальной конфигурации системы.

Тема 5. Практическое занятие (4 час.), Самостоятельная работа (25 час.). Методы

поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR). Анализ конфигурационных данных моделирования. Методы обработки конфигурационных данных.

Тема 6. Практическое занятие (4 час.), Самостоятельная работа (25 час.). Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе. Расчет парной корреляционной функции. Поиск количественных соотношений структура-свойство.

V УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами» включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

| № п/п | Вид самостоятельной работы | Дата/сроки выполнения | Примерные нормы времени на выполнение | Форма контроля |
|--------------|---|------------------------------|--|----------------------------------|
| 1 | Подготовка к практическим занятиям, изучение литературы | В течение семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 2 | Подготовка к практическим занятиям | 1-3 неделя семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 3 | Подготовка к практическим занятиям | 4-6 неделя семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 4 | Подготовка к практическим занятиям | 7-9 неделя семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 5 | Подготовка к практическим занятиям | 10-12 неделя семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 6 | Подготовка к практическим занятиям | 13-15 неделя семестра | 15 часов | Работа на практических занятиях. |
| 7 | Подготовка к экзамену | 16-18 неделя семестра | 13 часов | Экзамен |

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

Планирование и организация времени, отведенного на выполнение заданий самостоятельной работы.

Изучив график выполнения самостоятельных работ, следует правильно её организовать. Рекомендуется изучить структуру каждого задания, обратить внимание на график выполнения работ, отчетность по каждому заданию предоставляется в последнюю неделю согласно графику. Обратите внимание, что итоги самостоятельной работы влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины.

Работа с литературой.

При выполнении ряда заданий требуется работать с литературой. Рекомендуется

использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ (<http://www.dvfu.ru/library/>) и других ведущих вузов страны, а также доступных для использования научно-библиотечных систем.

В процессе выполнения самостоятельной работы рекомендуется работать со следующими видами изданий:

а) Научные издания, предназначенные для научной работы и содержащие теоретические, экспериментальные сведения об исследованиях. Они могут публиковаться в форме: монографий, научных статей в журналах или в научных сборниках;

б) Учебная литература подразделяется на:

- учебные издания (учебники, учебные пособия, тексты лекций), в которых содержится наиболее полное системное изложение дисциплины или какого-то ее раздела;

- справочники, словари и энциклопедии – издания, содержащие краткие сведения научного или прикладного характера, не предназначенные для сплошного чтения. Их цель – возможность быстрого получения самых общих представлений о предмете.

Существуют два метода работы над источниками:

– сплошное чтение обязательно при изучении учебника, глав монографии или статьи, то есть того, что имеет учебное значение. Как правило, здесь требуется повторное чтение, для того чтобы понять написанное. Старайтесь при сплошном чтении не пропускать комментарии, сноски, справочные материалы, так как они предназначены для пояснений и помощи. Анализируйте рисунки (карты, диаграммы, графики), старайтесь понять, какие тенденции и закономерности они отражают;

– метод выборочного чтения дополняет сплошное чтение; он применяется для поисков дополнительных, уточняющих необходимых сведений в словарях, энциклопедиях, иных справочных изданиях. Этот метод крайне важен для повторения изученного и его закрепления, особенно при подготовке к зачету.

Для того чтобы каждый метод принес наибольший эффект, необходимо фиксировать все важные моменты, связанные с интересующей Вас темой.

Тезисы – это основные положения научного труда, статьи или другого произведения, а возможно, и устного выступления; они несут в себе большой объем информации, нежели план. Простые тезисы лаконичны по форме; сложные – помимо главной авторской мысли содержат краткое ее обоснование и доказательства, придающие тезисам более весомый и убедительный характер. Тезисы прочитанного позволяют глубже раскрыть его содержание; обучаясь излагать суть прочитанного в тезисной форме, вы сумеете выделять из множества мыслей авторов самые главные и ценные и делать обобщения.

Конспект – это способ самостоятельно изложить содержание книги или статьи в логической последовательности. Конспектируя какой-либо источник, надо стремиться к тому, чтобы немногими словами сказать о многом. В тексте конспекта желательно поместить не только выводы или положения, но и их аргументированные доказательства (факты, цифры, цитаты).

Писать конспект можно и по мере изучения произведения, например, если прорабатывается монография или несколько журнальных статей.

Составляя тезисы или конспект, всегда делайте ссылки на страницы, с которых вы взяли конспектируемое положение или факт, – это поможет вам сократить время на поиск нужного места в книге, если возникает потребность глубже разобраться с излагаемым вопросом или что-то уточнить при написании письменных работ.

Методические рекомендации по выполнению заданий для самостоятельной работы и критерии оценки.

Отчёты по практическим работам представляются в электронной форме, подготовленные как текстовые документы в редакторе MS Word.

Отчёт по работе должен быть обобщающим документом, включать всю информацию по выполнению заданий, в том числе, построенные диаграммы, таблицы, приложения, список литературы и (или) расчеты, с сопровождением необходимыми пояснениями и иллюстрациями в виде схем, экранных форм («скриншотов») и т. д.

Структурно отчёт по практической работе, как текстовый документ, комплектуется по следующей схеме:

- Титульный лист – обязательная компонента отчета, первая страница отчёта, по принятой для практических работ форме (титульный лист отчёта должен размещаться в общем файле, где представлен текст отчёта);

- Исходные данные к выполнению заданий – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержат указание варианта, темы и т.д.);

- Основная часть – материалы выполнения заданий, разбивается по рубрикам, соответствующих заданиям работы, с иерархической структурой: разделы – подразделы – пункты – подпункты и т. д. (рекомендуется в основной части отчета заголовки рубрик (подрубрик) давать исходя из формулировок заданий, в форме отглагольных существительных);

- Выводы – обязательная компонента отчета, содержит обобщающие выводы по работе (какие задачи решены, оценка результатов, что освоено при выполнении работы);

- Список литературы – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержит список источников, использованных при выполнении работы, включая электронные источники (список нумерованный, в соответствии с правилами описания библиографии);

- Приложения – необязательная компонента отчета, с новой страницы, содержит дополнительные материалы к основной части отчета.

Набор текста осуществляется на компьютере, в соответствии со следующими требованиями:

- печать – на одной стороне листа белой бумаги формата А4 (размер 210 на 297 мм.);

- интервал межстрочный – полуторный;

- шрифт – Times New Roman;

- размер шрифта - 14 пт., в том числе в заголовках (в таблицах допускается 10-12 пт.);

- выравнивание текста – «по ширине»;

- поля страницы: левое – 25-30 мм., правое – 10 мм., верхнее и нижнее – 20 мм.;

- нумерация страниц – в правом нижнем углу страницы (для страниц с книжной ориентацией), сквозная, от титульного листа до последней страницы, арабскими цифрами (первой страницей считается титульный лист, на котором номер не ставится, на следующей странице проставляется цифра «2» и т. д.).

- режим автоматического переноса слов, за исключением титульного листа и заголовков всех уровней (перенос слов для отдельного абзаца блокируется средствами MSWord с помощью команды «Формат» – абзац при выборе опции «запретить автоматический перенос слов»).

Если рисунок или таблица размещены на листе формата больше А4, их следует учитывать как одну страницу. Номер страницы в этих случаях допускается не проставлять.

Список литературы и все приложения включаются в общую сквозную нумерацию страниц работы.

Критерии оценки.

| Оценка | Требования |
|-----------------------|--|
| «Отлично» | если ответ показывает прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа; умение приводить примеры современных проблем изучаемой области. |
| «Хорошо» | ответ, обнаруживающий прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа. Однако допускается одна – две неточности в ответе. |
| «Удовлетворительно» | оценивается ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой предметной области, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы; знанием основных вопросов теории; слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры. Допускается несколько ошибок в содержании ответа; неумение привести пример развития ситуации, провести связь с другими аспектами изучаемой области. |
| «Неудовлетворительно» | ответ, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы; незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов; неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Допускаются серьезные ошибки в содержании ответа; незнание современной проблематики изучаемой области. |

VI КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

| № п/п | Контролируемые разделы / темы дисциплины | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения | Оценочные средства | |
|---|---|---|--|---|------------------------------|
| | | | | текущий контроль | промежуточна я аттестация |
| 1 | Раздел I. Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами | ПК-3.1 Разрабатывает рекомендации по составу и способам обработки конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Знает способы обработки материалов с целью повышения их конкурентоспособности | Отчет (ПР-6) Практическое занятие 1-3 | Зачет |
| | | | Умеет правильно подбирать режимы обработки материалов для повышения их конкурентоспособности | | |
| | | | Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач | | |
| | | ПК-4.2 Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Знает стандартные пакеты компьютерных программ | Отчет (ПР-6) Практическое занятие 4 | Зачет |
| | | | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ | | |
| | | | Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач | | |
| ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с | Знает стандартные пакеты компьютерных программ | Отчет (ПР-6) Практическое занятие 5 | Зачет | | |
| | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ | | | | |

| | | | | | |
|--|--|--|--|--|-------|
| | | заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач | | |
| | | ПК-6.1 Осуществляет разработку нового материала с учетом обоснованного выбора технологического оборудования | Знает современные методы моделирования свойств материалов | Отчет (ПР-6) Практическое занятие 6 | Зачет |
| | | | Умеет ставить задачи для компьютерного поиска новых материалов | | |
| | | | Владеет навыками прогнозирования и оптимизации свойств материалов | | |

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие результаты обучения, представлены в Приложении

VII СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Елизаров, И.А. Моделирование систем : учебное пособие для вузов / И.А. Елизаров, Ю.Ф. Мартемьянов, А.Г. Схиртладзе [и др.]. – Старый Оскол : ТНТ, 2015. – 135 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<https://library.dvfu.ru/lib/document/EK/563BE924-30AF-4F6A-8779-C87E9B15C90B/>

2. Ивин, В.В. Структурный анализ и проектирование информационных систем : учебное пособие / В.В. Ивин ; Дальневосточный федеральный университет, Школа экономики и менеджмента. – Владивосток : Изд-во Дальневосточного федерального университета, 2013. – 182 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:717543>

3. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела : [учебное руководство] / Ч. Киттель ; [пер. под общ. ред. А. А. Гусева]. – М : Альянс, 2013 ; [МедиаСтар], 2016. – 791 ; 790 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<https://library.dvfu.ru/lib/document/EK/634B695B-316E-4C87-8A17-D98531BAF2A9/>

<https://library.dvfu.ru/lib/document/EK/09446E22-DD12-492C-BDBE-DECB5D87E0B4/>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Бахвалов, Л.А. Моделирование систем [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л.А. Бахвалов. – М. : Горная книга, 2006. – 295 с.

ЭБС «Лань»:

<https://e.lanbook.com/book/3511>

2. Советов, Б.Я. Моделирование систем : учебник / Б.Я. Советов, С.А. Яковлев. – М. : Высшая школа, 1985. – 271 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:683053>

3. Р. Шеннон, Имитационное моделирование систем - искусство и наука: пер. с англ. / Р. Шеннон. – М. : Мир, 1978. – 418 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:672612>

4. В. Боев, Моделирование систем. Инструментальные средства GPSS World : [учебное пособие] / В. Боев – СПб. : БХВ-Петербург, 2004. – 348 с.

ПОК НБ ДВФУ:

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:660951>

5. Афонин, В.В. Моделирование систем [Электронный ресурс]/ Афонин В.В., Федосин С.А. – М.: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), 2016. – 269 с.

ЭБС «IPRbooks»:

<http://www.iprbookshop.ru/89448.html>

6. Смирнов, Г.В. Моделирование и оптимизация объектов и процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Г.В. Смирнов – Томск: Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 2016. – 216 с.

ЭБС «IPRbooks»:

<http://www.iprbookshop.ru/72047.html>

7. Мирзоев, М.С. Основы математической обработки информации [Электронный ресурс] : учебное пособие / М.С. Мирзоев. – М. : Издательство "Прометей", 2016. – 316 с.

ЭБС «Лань»:

<https://e.lanbook.com/book/89712>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. <http://www.vasp.at/>
2. <http://lammms.sandia.gov>
3. <https://postnauka.ru/video/20749>
4. <http://www.materialsdesign.com/>
5. <http://nuclphys.sinp.msu.ru/solidst/index.html#c>

Перечень информационных технологий и программного обеспечения

1. Пакет программного обеспечения Microsoft Office (Word, Outlook, Power Point, Excel, Photoshop)

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. База данных Scopus <http://www.scopus.com/home.url>
2. База данных Web of Science <http://apps.webofknowledge.com/>
3. База данных полнотекстовых академических журналов Китая <http://oversea.cnki.net/>
4. Электронные базы данных EBSCO <http://search.ebscohost.com/>

VIII МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Планирование и организация времени, отведенного на изучение дисциплины

Приступить к освоению дисциплины следует незамедлительно в самом начале учебного семестра. Рекомендуется изучить структуру и основные положения Рабочей программы дисциплины. Обратит внимание, что кроме аудиторной работы (лекции, лабораторные занятия) планируется самостоятельная работа, итоги которой влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины. Все задания (аудиторные и самостоятельные) необходимо выполнять и предоставлять на оценку в соответствии с графиком.

В процессе изучения материалов учебного курса предлагаются следующие формы работ: практические занятия, задания для самостоятельной работы.

Практические занятия акцентированы на наиболее принципиальных и проблемных вопросах курса и призваны стимулировать выработку практических умений.

Особо значимой для профессиональной подготовки студентов является *самостоятельная работа* по курсу. В ходе этой работы студенты отбирают необходимый материал по изучаемому вопросу и анализируют его. Студентам необходимо ознакомиться с основными источниками, без которых невозможно полноценное понимание проблематики курса.

Освоение курса способствует развитию навыков обоснованных и самостоятельных оценок фактов и концепций. Поэтому во всех формах контроля знаний, особенно при сдаче зачета, внимание обращается на понимание проблематики курса, на умение практически применять знания и делать выводы.

Работа с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ и электронные библиотеки (<http://www.dvfu.ru/library/>), а также доступные для использования другие научно-библиотечные системы.

Подготовка к экзамену. К сдаче экзамена допускаются обучающиеся, выполнившие все задания, предусмотренные учебной программой дисциплины, посетившие не менее 85% аудиторных занятий.

IX МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться в следующих помещениях, оснащенных соответствующим оборудованием и программным обеспечением, расположенных по адресу 690022, г. Владивосток, о.Русский, п. Аякс, 10:

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

| Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы ¹ | Оснащенность специальных помещений и помещений для проведения учебных занятий, для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа |
|--|---|--|
| Учебные аудитории для проведения учебных занятий: | | |

¹ В соответствии с п.4.3. ФГОС

| | | |
|-------------|--|---|
| <p>L450</p> | <p>11 компьютеров (системный блок модель - 30AGCT01WW P3+монитором AOC 28" LI2868POU). Учебная мебель, рабочее место преподавателя, доска, демонстрационное мультимедийное оборудование (ноутбук, мультимедиа-проектор, экран), доступ к Internet, доступ к системе ДВФУ по электронной поддержке обучения Black Board Learning.</p> | <p>IBM SPSS Statistics Premium Campus Edition. Поставщик ЗАО Прогностические решения. Договор ЭА-442-15 от 18.01.2016 г., лот 5. Срок действия договора с 30.06.2016 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>SolidWorks Campus 500. Поставщик Солид Воркс Р. Договор 15-04-101 от 23.12.2015 г. Срок действия договора с 15.03.2016 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>АСКОН Компас 3D v17. Поставщик Навиком. Договор 15-03-53 от 20.12.2015 г. Срок действия договора с 31.12.2015 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>MathCad Education Universety Edition. Поставщик Софт Лайн Трейд. Договор 15-03-49 от 02.12.2015 г. Срок действия договора с 30.11.2015 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>Windows Edu Per Device 10 Education. Поставщик Microsoft. Договор № ЭА-261-18 от 30.06.2018 г. Подписка. Срок действия договора с 30.06.2018 г. Лицензия - 30.06.2020 г.</p> <p>Office Professional Plus 2019. Поставщик Microsoft. Договор № ЭА-261-18 от 30.06.2018 г. Подписка. Срок действия договора с 30.06.2018 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>Autocad 2018. Поставщик Autodesk. Договор № 110002048940 от 27.10.2018 г. Сетевая, конкурентная. Срок действия договора с 27.10.2018 г. Лицензия - 27.10.2021 г.</p> <p>Сублицензионное соглашение Blackboard № 2906/1 от 29.06.2012.</p> |
|-------------|--|---|

| Помещения для самостоятельной работы: | | |
|---|--|---|
| <p>A1042 аудитория для самостоятельной работы студентов</p> | <p>Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 115 шт.; Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox; Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C; Полноцветный копр-принтер-сканер Xerox WorkCentre 7530 (WC7530CPS Оборудование для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья: Дисплей Брайля Focus-40 Blue – 3 шт.; Дисплей Брайля Focus-80 Blue; Рабочая станция Lenovo ThinkCentre E73z – 3 шт.; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Маркер-диктофон Touch Memo цифровой; Устройство портативное для чтения плоскочечатных текстов PEarl; Сканирующая и читающая машина для незрячих и слабовидящих пользователей SARA; Принтер Брайля Emprint SpotDot - 2 шт.; Принтер Брайля Everest - D V4; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Видео увеличитель Topaz 24" XL стационарный электронный; Обучающая система для детей тактильно-речевая, либо для людей с ограниченными возможностями здоровья; Увеличитель ручной видео RUBY портативный – 2 шт.; Экран Samsung S23C200B; Маркер-диктофон Touch Memo цифровой.</p> | <p>Microsoft Windows 7 Pro MAGic 12.0 Pro, Jaws for Windows 15.0 Pro, Open book 9.0, Duxbury BrailleTranslator, Dolphin Guide (контракт № A238-14/2); Неисключительные права на использование ПО Microsoft рабочих станций пользователей (контракт ЭА-261-18 от 02.08.2018): - лицензия на клиентскую операционную систему; - лицензия на пакет офисных продуктов для работы с документами включая формат.docx , .xlsx , .vsd , .ppt.; - лицензия па право подключения пользователя к серверным операционным системам , используемым в ДВФУ : Microsoft Windows Server 2008/2012; - лицензия на право подключения к серверу Microsoft Exchange Server Enterprise; - лицензия па право подключения к внутренней информационной системе документооборота и порталу с возможностью поиска информации во множестве удаленных и локальных хранилищах, ресурсах, библиотеках информации, включая порталные хранилища, используемой в ДВФУ: Microsoft SharePoint; - лицензия на право подключения к системе централизованного управления рабочими станциями, используемой в ДВФУ: Microsoft System Center.</p> |

Для проведения учебных занятий по дисциплине, а также для организации самостоятельной работы студентам доступно следующее лабораторное оборудование и специализированные кабинеты, соответствующие действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-производственных работ.

В целях обеспечения специальных условий обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ДВФУ все здания оборудованы пандусами, лифтами, подъемниками, специализированными местами, оснащенными туалетными комнатами, табличками информационно-навигационной поддержки.

Х. ФОНДЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонды оценочных средств представлены в приложении.

Для дисциплины «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами и» используются следующие оценочные средства:

Практическая работа 6 (ПР-6)

Методические рекомендации, определяющие процедуры оценивания результатов освоения дисциплины

Оценочные средства для промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Форма отчётности по дисциплине – экзамен (3-й, семестр)..

Методические указания по сдаче зачета

Зачет принимается ведущим преподавателем. При большом количестве групп у одного преподавателя или при большой численности потока по распоряжению заведующего кафедрой (заместителя директора по учебной и воспитательной работе) допускается привлечение в помощь ведущему преподавателю других преподавателей. В первую очередь привлекаются преподаватели, которые проводили лабораторные занятия по дисциплине в группах.

В исключительных случаях, по согласованию с заместителем директора Школы по учебной и воспитательной работе, заведующий кафедрой имеет право принять зачет в отсутствие ведущего преподавателя.

Форма проведения зачета (устная, письменная и др.) утверждается на заседании кафедры по согласованию с руководителем в соответствии с рабочей программой дисциплины.

Во время проведения зачета студенты могут пользоваться рабочей программой дисциплины, а также с разрешения преподавателя, проводящего зачет, справочной литературой и другими пособиями (учебниками, учебными пособиями, рекомендованной литературой и т.п.).

Время, предоставляемое студенту на подготовку к ответу на зачете, должно составлять не более 20 минут. По истечении данного времени студент должен быть готов к ответу.

Присутствие на зачете посторонних лиц (кроме лиц, осуществляющих проверку) без разрешения соответствующих лиц (ректора либо проректора по учебной и воспитательной работе, директора Школы, руководителя ОПОП или заведующего кафедрой), не допускается. Инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, не имеющие возможности самостоятельного передвижения, допускаются зачет с сопровождающими.

При промежуточной аттестации обучающимся устанавливается оценка «зачтено» или «не зачтено».

В зачетную книжку студента вносится только запись «зачтено», запись «не зачтено» вносится только в экзаменационную ведомость. При неявке студента на зачет в ведомости делается запись «не явился».

Критерии выставления оценки студенту на зачете

К экзамену допускаются обучающиеся, выполнившие программу обучения по дисциплине, прошедшие все этапы текущей аттестации.

| Оценка | Требования |
|------------------------------|--|
| «Отлично» | если ответ показывает прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа; умение приводить примеры современных проблем изучаемой области. |
| «Хорошо» | ответ, обнаруживающий прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа. Однако допускается одна – две неточности в ответе. |
| «Удовлетворительно» | оценивается ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой предметной области, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы; знанием основных вопросов теории; слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры. Допускается несколько ошибок в содержании ответа; неумение привести пример развития ситуации, провести связь с другими аспектами изучаемой области. |
| «Неудовлетворительно» | ответ, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы; незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов; неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Допускаются серьезные ошибки в содержании ответа; незнание современной проблематики изучаемой области. |

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
по дисциплине «Компьютерный дизайн материалов с заданными
свойствами»
Направление подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии
материалов
Программа магистратуры «Цифровое материаловедение
(совместно с МИСИС)»
Форма подготовки очная

Владивосток
2022

Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины / модуля

| № п/п | Контролируемые разделы / темы дисциплины | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения | Оценочные средства | | | |
|-------|--|--|--|----------------------------|--------------------------|----------------------------|-------|
| | | | | текущий контроль | промежуточная аттестация | | |
| 1 | Раздел I. Основы аппаратной и программной частей многопроцессорных вычислительных систем | ПК-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; | Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Лабораторная работа (ПР-6) | Зачет | | |
| | | | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | | | | |
| | | | Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач | | | | |
| | | ПК-4.2 – Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | | | Лабораторная работа (ПР-6) | Зачет |
| | | | Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования | | | | |
| | | | Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач | | | | |

Оценочные средства для промежуточной аттестации

| ерШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ результатов обучения по дисциплине | | | | |
|--|--------------------------------------|--|--|---|
| Оценка | 2 (неудовл.) | 3 (удовлетворительно) | 4 (хорошо) | 5 (отлично) |
| виды оценочных средств | | | | |
| Знания | Отсутствие знаний | Фрагментарные знания | Общие, но не структурированные знания | Сформированные систематические знания |
| Умения | Отсутствие умений | В целом успешное, но не систематическое умение | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера) | Успешное и систематическое умение |
| Навыки (владения, опыт деятельности) | Отсутствие навыков (владений, опыта) | Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта) | В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме | Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач |

Вопросы к экзамену

1. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.
2. Высокопроизводительные расчеты: аппаратная и программная компоненты, методы проведения высокопроизводительных расчетов;
3. Принципы передачи и обработки информации между сервером и клиентом; основные этапы проведения высокопроизводительных расчетов;
4. Основные принципы работы на суперкомпьютерах и вычислительных кластерах; расчет времени моделирования и объема затрачиваемых ресурсов; оптимизация расчетов.
5. Методы расчетов из первых принципов (*ab initio*). Методы Хартри-Фока.
6. Методы расчетов из первых принципов (*ab initio*). Методы пост-Хартри-Фока.
7. Особенности применения методов Хартри-Фока и возможности метода. Электронное строение системы.
8. Стационарное уравнение Шредингера и её решение для случая электронов. Используемые упрощения. Выбор волновой функции. Одноэлектронное приближение.
9. Методы расчетов из первых принципов (*ab initio*). Теория функционала плотности. Многоэлектронные системы и методы их изучения. Системы с несколькими степенями свободы. Проведение расчетов на примере молекулы водорода.
10. Метод функционала плотности. Конечные температуры. Функционал плотности для нестационарных систем. Функционал плотности в теории сверхпроводимости.

11. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.
12. Конструирование эффективных потенциалов межатомного взаимодействия. Параметризация потенциалов взаимодействия. Фазовая стабильность. Электрические свойства. Магнитные свойства. Разработка потенциалов EAM-типа для металлов.
13. Метод погруженного атома. Разработка многочастичных потенциалов и дизайн новых материалов.
14. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.
15. Предсказание оптических свойств материала на основе данных квантово-механических расчетов. Оптические свойства. Транспортные характеристики. Процесс транспорта электронов. Расчет электронной структуры атомов однокомпонентных металлов.

Критерии оценки к экзамену

| Оценка | Требования |
|------------------------------|--|
| «Отлично» | если ответ показывает прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа; умение приводить примеры современных проблем изучаемой области. |
| «Хорошо» | ответ, обнаруживающий прочные знания основных процессов изучаемой предметной области, отличается глубиной и полнотой раскрытия темы; владение терминологическим аппаратом; умение объяснять сущность, явлений, процессов, событий, делать выводы и обобщения, давать аргументированные ответы, приводить примеры; логичность и последовательность ответа. Однако допускается одна – две неточности в ответе. |
| «Удовлетворительно» | оценивается ответ, свидетельствующий в основном о знании процессов изучаемой предметной области, отличающийся недостаточной глубиной и полнотой раскрытия темы; знанием основных вопросов теории; слабо сформированными навыками анализа явлений, процессов, недостаточным умением давать аргументированные ответы и приводить примеры. Допускается несколько ошибок в содержании ответа; неумение привести пример развития ситуации, провести связь с другими аспектами изучаемой области. |
| «Неудовлетворительно» | ответ, обнаруживающий незнание процессов изучаемой предметной области, отличающийся неглубоким раскрытием темы; незнанием основных вопросов теории, несформированными навыками анализа явлений, процессов; неумением давать аргументированные ответы, слабым владением монологической речью, отсутствием логичности и последовательности. Допускаются серьезные ошибки в содержании ответа; незнание современной проблематики изучаемой области. |

Оценочные средства для текущего контроля

Текущая аттестация студентов по дисциплине проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Текущая аттестация проводится в форме контрольных мероприятий: практических работ по оцениванию фактических результатов обучения студентов и осуществляется ведущим преподавателем.

Объектами оценивания выступают:

- учебная дисциплина (активность на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий, посещаемость всех видов занятий по аттестуемой дисциплине);
- степень усвоения теоретических знаний;
- уровень овладения практическими умениями и навыками по всем видам учебной работы;
- результаты самостоятельной работы.

Текущая аттестация выполняется по результату оценки выполненной лабораторной работы (ПР-6).

Тематика практических работ

1. Изучение и алгоритмизация моделей физических систем
2. Планирование и анализ статистических экспериментов
3. Обработка и анализ результатов моделирования

Критерии оценивания

| Оценка | Требования |
|--------------|--|
| «зачтено» | Студент показал развернутый ответ на вопрос, знание литературы, обнаружил понимание материала, обоснованность суждений, неточности в ответе исправляет самостоятельно. |
| «не зачтено» | Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ. |

Список тем рефератов

1. Метод молекулярной динамики. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов.
2. Моделирование динамики атомов и молекул. Основные этапы моделирования: теоретические основы, уравнения движения, интегрирование уравнений движения, краевые условия. Метод молекулярной динамики в дизайне новых материалов.
3. Статистическое моделирование. Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы.
1. 4 Метод моделирования Монте-Карло. Методы ускорения расчетов на основе метода Монте-Карло. Обратный метод моделирования Монте-Карло. Виды методов моделирования Монте-Карло. Определение начальной конфигурации системы.
4. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR). Анализ конфигурационных данных моделирования. Методы обработки конфигурационных данных.

5. Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе. Расчет парной корреляционной функции. Поиск количественных соотношений структура-свойство.

Критерии оценки реферата

5 баллов (отлично), выставляется студенту, если студент точно определил содержание темы реферата и составляющие; работа характеризуется смысловой целостностью, связностью и последовательность изложения; приведены литературные данные, статистические сведения; студент владеет навыком самостоятельного поиска необходимой по теме реферата информации, методами поиска информации, приемами анализа и выбора теоретической информации; фактических ошибок, связанных с пониманием и раскрытием темы доклада нет.

4 балла (хорошо) выставляется, если студент достаточно точно определил содержание реферата и составляющие; работа характеризуется смысловой целостностью, связностью и последовательность изложения; допущено незначительные ошибки при объяснении содержания темы; приведены литературные данные; студент владеет навыком самостоятельного поиска необходимой по теме информации; фактических ошибок, связанных с пониманием и раскрытием темы нет.

3 балла (удовлетворительно) выставляется, если студент если студент по теме реферата определил основное его содержание и составляющие; понимает базовые теоретические основы темы доклада ; допущено незначительные ошибки при объяснении содержания темы доклада; не приведены литературные данные; студент показывает не достаточное обладание навыком самостоятельного поиска необходимой по теме доклада информации; имеются незначительные фактические ошибки, связанные с пониманием и раскрытием темы реферата.