

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



» 20\_\_ г.

подписано электронно-цифровой подписью

## Программа дисциплины

Компьютерный дизайн новых материалов Б1.В.ДВ.07.01

Направление подготовки: 27.03.05 - Инноватика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2019

Автор(ы): Галимзянов Б.Н.

Рецензент(ы): Мокшин А.В.

### СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Мокшин А. В.

Протокол заседания кафедры № \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" 20\_\_ г.

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК № \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" 20\_\_ г.

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
  - 6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения
  - 6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания
  - 6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы
  - 6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
  - 7.1. Основная литература
  - 7.2. Дополнительная литература
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. Галимзянов Б.Н. (кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов, научно-педагогическое отделение), bulatg@mail.ru

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Выпускник, освоивший дисциплину, должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-2	способностью использовать инструментальные средства
ПК-1	способностью использовать нормативные документы по качеству, стандартизации в практической деятельности

Выпускник, освоивший дисциплину:

Должен знать:

- современные методы моделирования свойств материалов
- теоретические основы методов моделирования. Их преимущества и недостатки
- основы высокопроизводительных вычислительных систем

Должен уметь:

- пользоваться программными средствами для моделирования свойств материалов
- оценивать время- и ресурсозатратность различных методов моделирования
- делать выводы о свойствах материалов на основе результатов моделирования
- использовать полученные навыки на практике

Должен владеть:

- навыками прогнозирования и оптимизации свойств материалов.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные навыки на практике.

## 2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.07.01 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 27.03.05 "Инноватика (не предусмотрено)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 4 курсе в 7 семестре.

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 72 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 54 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 72 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 7 семестре.

## 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

### 4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
	Тема 1. Введение. Роль					

моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.	7	2	3	0	8
3.	Тема 3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.	7	2	3	0	8
4.	Тема 4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.	7	1	6	0	6
5.	Тема 5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.	7	1	3	0	6
6.	Тема 6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.	7	1	6	0	6
7.	Тема 7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.	7	2	6	0	6
8.	Тема 8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.	7	2	3	0	6
9.	Тема 9. Методы молекулярной динамики.	7	1	9	0	6
10.	Тема 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.	7	2	6	0	6
11.	Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).	7	2	6	0	6
	Итого		18	54	0	72

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. 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 и их развитие. Преимущества и недостатки компьютерного моделирования. Основные возможности и отличие от традиционного эксперимента.

##### Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.

Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации. 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. 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.

#### **Тема 4. 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. Входные и выходные параметры расчетов.

#### **Тема 5. 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. Особенности *ab initio* расчетов.

#### **Тема 6. 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 EAM-типа для металлов. Метод погруженного атома. Разработка многочастичных потенциалов и дизайн новых материалов.

#### **Тема 7. 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 энергия связи частиц и восстановление потенциала взаимодействия.

#### **Тема 8. Ограничения *ab initio* методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.**

Точность расчетов. Времязатратность и оптимизация расчетов. Ресурсоемкость. Минимизация ошибок и оптимизация расчетов. Выбор критерии оценки точности. Определение точности. Определение ресурсоемкости при выполнении *ab initio* расчетов. Определение абсолютной и относительной погрешностей расчетов. Использование приближений.

#### **Тема 9. Методы молекулярной динамики.**

Метод молекулярной динамики. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов. 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 10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.**

Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы. Метод Монте-Карло моделирования. Методы ускорения расчетов на основе метода Монте-Карло. Обратный метод Монте-Карло моделирования. Виды методов Монте-Карло моделирования. Определение начальной конфигурации системы.

#### **Тема 11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).**

Методы поиска материалов с заданными свойствами. Анализ конфигурационных данных моделирования. Методы обработки конфигурационных данных. Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе. Расчет парной корреляционной функции. Поиск количественных соотношений структура-свойство.

### **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301).

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений".

Положение от 29 декабря 2018 г. № 0.1.1.67-08/328 "О порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Положение № 0.1.1.67-06/241/15 от 14 декабря 2015 г. "О формировании фонда оценочных средств для проведения текущей, промежуточной и итоговой аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Положение № 0.1.1.56-06/54/11 от 26 октября 2011 г. "Об электронных образовательных ресурсах федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/66/16 от 30 марта 2016 г. "Разработки, регистрации, подготовки к использованию в учебном процессе и удаления электронных образовательных ресурсов в системе электронного обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/11/16 от 25 января 2016 г. "О балльно-рейтинговой системе оценки знаний обучающихся в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/91/13 от 21 июня 2013 г. "О порядке разработки и выпуска учебных изданий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

## 6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

### 6.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
<b>Семестр 7</b>			
	<b>Текущий контроль</b>		
1	Дискуссия	ОПК-2	1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.
2	Дискуссия	ПК-1	2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.
3	Дискуссия	ОПК-2	3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.
4	Контрольная работа	ПК-1 , ОПК-2	4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.
5	Дискуссия	ОПК-2	5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.
6	Контрольная работа	ПК-1	6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.
7	Дискуссия	ОПК-2	7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.
8	Контрольная работа	ПК-1	8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.
9	Дискуссия	ОПК-2	9. Методы молекулярной динамики.
10	Дискуссия	ПК-1	10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.
11	Презентация	ОПК-2	11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).
	<b>Зачет</b>	ОПК-2, ПК-1	

### 6.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
<b>Семестр 7</b>					

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
<b>Текущий контроль</b>					
Дискуссия	Высокий уровень владения материалом по теме дискуссии. Превосходное умение формулировать свою позицию, отстаивать её в споре, задавать вопросы, обсуждать дискуссионные положения. Высокий уровень этики ведения дискуссии.	Средний уровень владения материалом по теме дискуссии. Хорошее умение формулировать свою позицию, отстаивать её в споре, задавать вопросы, обсуждать дискуссионные положения. Средний уровень этики ведения дискуссии.	Низкий уровень владения материалом по теме дискуссии. Слабое умение формулировать свою позицию, отстаивать её в споре, задавать вопросы, обсуждать дискуссионные положения. Низкий уровень этики ведения дискуссии.	Недостаточный уровень владения материалом по теме дискуссии. Неумение формулировать свою позицию, отстаивать её в споре, задавать вопросы, обсуждать дискуссионные положения. Отсутствие этики ведения дискуссии.	1 2 3 5 7 9 10
Контрольная работа	Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продемонстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьёзные ошибки. Продемонстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены менее чем наполовину. Продемонстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	4 6 8
Презентация	Превосходный уровень владения материалом. Высокий уровень доказательности, наглядности, качества преподнесения информации. Степень полноты раскрытия материала и использованные решения полностью соответствуют задачам презентации. Использованы надлежащие источники и методы.	Хороший уровень владения материалом. Средний уровень доказательности, наглядности, качества преподнесения информации. Степень полноты раскрытия материала и использованные решения в основном соответствуют задачам презентации. Использованные источники и методы в основном соответствуют поставленным задачам.	Удовлетворительный уровень владения материалом. Низкий уровень доказательности, наглядности, качества преподнесения информации. Степень полноты раскрытия материала и использованные решения слабо соответствуют задачам презентации. Использованные источники и методы частично соответствуют поставленным задачам.	Неудовлетворительный уровень владения материалом. Неудовлетворительный уровень доказательности, наглядности, качества преподнесения информации. Степень полноты раскрытия материала и использованные решения не соответствуют задачам презентации. Использованные источники и методы не соответствуют поставленным задачам.	11
	<b>Зачтено</b>		<b>Не зачтено</b>		
Зачет	Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины.		Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.		

**6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

**Семестр 7**

**Текущий контроль**

**1. Дискуссия**

Тема 1

1. История и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования
2. Области применения компьютерного моделирования
3. Достижения современной науки
4. История развития компьютеров и электронных устройств
5. Языки программирования и их развитие
6. Методы моделирования и их становление
7. Компьютерное моделирование
8. Области применения
9. Решаемые задачи
10. Преимущества и недостатки компьютерного моделирования
11. Основные возможности и отличие от традиционного эксперимента
12. Существующие методы компьютерного моделирования

**2. Дискуссия**

Тема 2

1. Аппаратная и программная компоненты
2. Методы организации
3. Методы проведения высокопроизводительных расчетов
4. Структура суперкомпьютеров
5. Принципы передачи и обработки информации между сервером и клиентом
6. Основные этапы проведения высокопроизводительных расчетов
8. Виды расчетов
9. Основные принципы работы на суперкомпьютерах и вычислительных кластерах
10. Расчет времени моделирования и объема затрачиваемых ресурсов
11. Оптимизация расчетов. Основные методы оптимизации

**3. Дискуссия**

Тема 3

1. Методы компьютерного моделирования
2. Моделирование динамики атомов и молекул
3. Методы получения информации о межатомных взаимодействиях
4. Метод расчета из первых принципов (ab-initio)
5. Основные этапы моделирования
6. Особенности метода
7. Ограничения ab-initio метода
8. Вычислительные пакеты для ab-initio расчетов
9. Работа с пакетом VASP
10. Определение входных и выходных величин

**4. Контрольная работа**

Тема 4

1. Методы Хартри-Фока
2. Электронное строение системы
3. Стационарное уравнение Шредингера. Решение уравнения
4. Используемые упрощения
5. Адиабатическое приближение
6. Выбор волновой функции
7. Решение уравнения Шредингера для электронов
8. Одноэлектронное приближение
9. Волновая функция многоэлектронной системы
10. Приближение Хартри-Фока
11. Система уравнений Рутаана-Холла

**5. Дискуссия**

Тема 5

1. Многоэлектронные системы
2. Обмен и корреляция

3. Системы с несколькими степенями свободы: молекула водорода
4. Метод функционала плотности
5. Метод Томаса-Ферми: пример функционала плотности
6. Теоремы Кона-Хоэнберга
7. Конечные температуры: теория Мермина
8. Функционал плотности для нестационарных систем
9. Функционал спиновой плотности
10. Функционал плотности в теории сверхпроводимости

## **6. Контрольная работа**

Тема 6

1. Фазовая стабильность
2. Электрические свойства
3. Термомеханические свойства
4. Магнитные свойства
5. Конструирование эффективных потенциалов межатомного взаимодействия
6. Параметризация потенциалов взаимодействия
7. Разработка потенциалов ЕАМ-типа для металлов
8. Использование результатов ab-initio - расчетов при моделировании классическим методом молекулярной динамики
9. Метод погруженного атома
10. Разработка многочастичных потенциалов и дизайн новых материалов

## **7. Дискуссия**

Тема 7

1. Оптические свойства
2. Транспортные характеристики
3. ИК и рамановские спектры
4. Процесс транспорта электронов
5. Электронные орбитали
6. Расчет электронной структуры атомов однокомпонентных металлов
7. Расчет энергии взаимодействия атомов/молекул
8. Энергия связи частиц
9. Восстановление потенциала взаимодействия
10. Предсказание оптических свойств материала на основе данных квантово-механических расчетов

## **8. Контрольная работа**

Тема 8

1. Определение точности
2. Определение и корректировка времени проведения расчетов
3. Определение ресурсоемкости при выполнении ab-initio расчетов
4. Выбор метода расчета
5. Определение абсолютной погрешности расчетов
6. Определение относительной погрешности
7. Сравнение результатов с экспериментом
8. Выбор критериев оценки точности
9. Использование приближений
10. Минимизация ошибок и оптимизация расчетов

## **9. Дискуссия**

Тема 9

1. Моделирование динамики атомов и молекул.
2. Метод молекулярной динамики
3. Теоретические основы
4. Уравнения движения
5. Интегрирование уравнений движения
6. Краевые условия
7. Основные этапы моделирования
8. Метод молекулярной динамики в дизайне новых материалов
9. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов
10. Моделирование в различных ансамблях

## **10. Дискуссия**

Тема 10

1. Метод Монте-Карло моделирования

2. Виды и модификации
3. Обратный метод Монте-Карло моделирования
4. Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы
5. Виды методов Монте-Карло моделирования
6. Методы минимизации энергии
7. Определение начальной конфигурации системы
8. Стохастическое моделирование
9. Оптимизация расчетов
10. Методы ускорения расчетов на основе метода Монте-Карло

### **11. Презентация**

Тема 11

1. Анализ конфигурационных данных моделирования
2. Методы обработки конфигурационных данных
3. Исследование структуры материала
4. Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования
5. Методы Вороного и Делоне
6. Расчет параметров локального и глобального ориентационного порядка
7. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе.
8. Статистическая трактовка
9. Расчет парной корреляционной функции
10. Расчет структурного фактора и сравнение с экспериментом
11. Расчет динамического структурного фактора
12. Поиск количественных соотношений структура-свойство
13. Методы поиска материалов с заданными свойствами

### **Зачет**

Вопросы к зачету:

1. История и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования.
2. Области применения компьютерного моделирования.
3. Методы компьютерного моделирования.
4. Основные принципы моделирования.
5. Ключевые этапы компьютерного моделирования.
6. Построение модели. Классификация моделей.
7. Определение точности расчетов.
8. Оценка ресурсозатратности.
9. Особенности применения компьютерного моделирования для прогнозирования свойств материалов.
10. Особенности предсказания структуры различных систем.
11. Метод молекулярной динамики. Основные этапы моделирования.
12. Особенности выполнения молекулярно-динамических расчетов.
13. Методы кластерного и структурного анализа результатов молекулярно-динамических расчетов.
14. Статистическая трактовка.
15. Расчет парной корреляционной функции.
16. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе.
17. Расчет транспортных характеристик.
18. Метод расчета из первых принципов (ab-initio).
19. Методы Хартри-Фока.
20. Теория функционала плотности.
21. Метод Монте-Карло моделирования.
22. Обратный метод Монте-Карло моделирования.
23. Особенности параметризации эффективного потенциала межчастичного взаимодействия.

### **6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

В КФУ действует балльно-рейтинговая система оценки знаний обучающихся. Суммарно по дисциплине (модулю) можно получить максимум 100 баллов за семестр, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов.

Для зачёта:

56 баллов и более - "зачтено".

55 баллов и менее - "не зачтено".

Для экзамена:

86 баллов и более - "отлично".

71-85 баллов - "хорошо".

56-70 баллов - "удовлетворительно".

55 баллов и менее - "неудовлетворительно".

Форма контроля	Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	Этап	Количество баллов
<b>Семестр 7</b>			
<b>Текущий контроль</b>			
Дискуссия	На занятии преподаватель формулирует проблему, не имеющую однозначного решения. Обучающиеся предлагают решения, формулируют свою позицию, задают друг другу вопросы, выдвигают аргументы и контраргументы в режиме дискуссии. Оцениваются владение материалом, способность генерировать свои идеи и давать обоснованную оценку чужим идеям, задавать вопросы и отвечать на вопросы, работать в группе, придерживаться этики ведения дискуссии.	1 2 3 5 7 9 10	6 6 6 4 4 4 4
Контрольная работа	Контрольная работа проводится в часы аудиторной работы. Обучающиеся получают задания для проверки усвоения пройденного материала. Работа выполняется в письменном виде и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	4 6 8	4 4 4
Презентация	Обучающиеся выполняют презентацию с применением необходимых программных средств, решая в презентации поставленные преподавателем задачи. Обучающийся выступает с презентацией на занятии или сдаёт её в электронном виде преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме презентации, логичность, информативность, способы представления информации, решение поставленных задач.	11	4
Зачет	Зачёт нацелен на комплексную проверку освоения дисциплины. Обучающийся получает вопрос (вопросы) либо задание (задания) и время на подготовку. Зачёт проводится в устной, письменной или компьютерной форме. Оценивается владение материалом, его системное освоение, способность применять нужные знания, навыки и умения при анализе проблемных ситуаций и решении практических заданий.		50

## 7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

### 7.1 Основная литература:

Тюкачев, Н.А. С#. Основы программирования [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.А. Тюкачев, В.Г. Хлебостроев. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 272 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/104962>. - Загл. с экрана.

Залогова, Л.А. Основы объектно-ориентированного программирования на базе языка С# [Электронный ресурс] : учебное пособие / Л.А. Залогова. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 192 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/106731>. - Загл. с экрана.

Петров, А.В. Моделирование процессов и систем [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.В. Петров. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2015. - 288 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/68472>. - Загл. с экрана.

Горлач, Б.А. Математическое моделирование. Построение моделей и численная реализация [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.А. Горлач, В.Г. Шахов. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 292 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/103190>. - Загл. с экрана.

Никулин, Е.А. Компьютерная графика. Модели и алгоритмы [Электронный ресурс] : 2018-07-12 / Е.А. Никулин. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 708 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/107948>. - Загл. с экрана.

## 7.2. Дополнительная литература:

Лейкова, М.В. Инженерная компьютерная графика : методика решения проекционных задач с применением 3D-моделирования [Электронный ресурс] : учебное пособие / М.В. Лейкова, И.В. Бычкова. - Электрон. дан. - Москва : МИСИС, 2016. - 92 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/93600>. - Загл. с экрана.

Емельянов, В.В. Теория и практика эволюционного моделирования [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Емельянов, В.В. Курейчик, В.М. Курейчик. - Электрон. дан. - Москва : Физматлит, 2003. - 432 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2148>. - Загл. с экрана.

Никулин, Е.А. Компьютерная графика. Оптическая визуализация [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е.А. Никулин. - Электрон. дан. - Санкт-Петербург : Лань, 2018. - 200 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/108463>. - Загл. с экрана.

## 8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Васп - <http://www.vasp.at/>

Лампс - <http://lammps.sandia.gov>

Лекция Оганова - <https://postnauka.ru/video/20749>

Материал дизайн - <http://www.materialsdesign.com/>

МГУ - <http://nuclphys.sinp.msu.ru/solidst/index.html#c>

## 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	При подготовке к лекционным занятиям, обучающимся необходимо заранее повторить пройденные ранее материалы. При необходимости можно воспользоваться основной и дополнительной литературой. Для конспектирования материала необходимо иметь общую тетрадь с числом страниц не менее 48 и ручку/карандаш. Рекомендуется активно участвовать в обсуждении нового материала. При возникновении вопросов/недопонимания необходимо обратиться к преподавателю.
практические занятия	При подготовке к практическим занятиям, обучающимся необходимо повторить пройденный материал, воспользовавшись конспектами лекций, а также основной и дополнительной литературой. Для получения дополнительной информации также можно воспользоваться Интернет-ресурсами. Необходимо при себе иметь тетрадь с числом страниц не менее 12.
самостоятельная работа	Для организации самостоятельной работы и при подготовке к лабораторным занятиям обучающимся рекомендуется изучать дополнительную литературу по пройденным темам. Обучающиеся должны пользоваться конспектами лекций, своевременно выполнять аудиторные и домашние задания и уметь пользоваться Интернет-ресурсами.
дискуссия	При подготовке к дискуссии студенты должны освоить подробную информацию по выбранной теме. Для этого рекомендуется изучить дополнительную литературу и пользоваться Интернет-ресурсами. По каждой выбранной теме необходимо выделить ключевые/основные вопросы для более детального обсуждения. По каждой теме количество вопросов не менее 5.
контрольная работа	При подготовке к контрольной работе необходимо повторить все пройденные темы. При необходимости нужно воспользоваться основной и дополнительной литературой, а также Интернет-ресурсами. Во время проведения контрольной работы будут заданы не менее 5 вопросов, на которые необходимо дать краткие ответы.
презентация	При оформлении презентации следует воспользоваться программой Microsoft Office PowerPoint. В презентации должны быть представлены основные результаты по компьютерному моделированию процессов. Презентация должна содержать титульную страницу, содержание, цель и задачи, основную часть и заключение. Длительность выступления/доклада не должна превышать 15 минут.

Вид работ	Методические рекомендации
зачет	При подготовке к зачету необходимо изучить все пройденные темы и изучить дополнительную литературу. Необходимо пользоваться Интернет-ресурсами. По каждой пройденной теме рекомендуется подготовить краткий конспект для лучшего усвоения материала. Зачетный билет будет содержать два теоретических вопроса по пройденным темам и одно практическое задание.

**10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Освоение дисциплины "Компьютерный дизайн новых материалов" предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows Professional 7 Russian

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

**11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Освоение дисциплины "Компьютерный дизайн новых материалов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

**12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;

- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 27.03.05 "Инноватика" и профилю подготовки не предусмотрено .