

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский



» 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Компьютерный дизайн новых материалов Б1.В.ДВ.01.01

Направление подготовки: 12.03.04 - Биотехнические системы и технологии

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., Недопекин О.В.

Рецензент(ы): Никитин С.И.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Мокшин А. В.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 20__ г.

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No ____ 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), bulatgnmail@gmail.com ; заместитель директора по образовательной деятельности Недопекин О.В. (Директорат Института физики, Институт физики), Oleg.Nedopekin@kpfu.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
ПК-2	Способность к математическому моделированию элементов и процессов биотехнических систем, их исследованию на базе профессиональных пакетов автоматизированного проектирования и самостоятельно разработанных программных продуктов
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

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 средами 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.01.01 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 12.03.04 "Биотехнические системы и технологии (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 с оценкой 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	
1.	Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.	7	2	3	0	8
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 метода 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 энергии 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 критериев 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
Семестр 7			
	Текущий контроль		
1	Дискуссия	ПК-2	1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур.
2	Дискуссия	ПК-2	2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации.
3	Дискуссия	УК-1	3. Методы расчетов из первых принципов (ab initio). Методы Хартри-Фока.
4	Письменная работа	УК-1	4. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): методы пост-Хартри-Фока.
5	Дискуссия	ПК-2	5. Методы расчетов из первых принципов (ab initio): теория функционала плотности.
6	Контрольная работа	УК-1	6. Возможности ab initio методов: фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства.
7	Дискуссия	УК-1	7. Возможности ab initio методов: оптические свойства, транспортные свойства. ИК и рамановские спектры.
8	Письменная работа	ПК-2	8. Ограничения ab initio методов: точность, времязатратность, ресурсоемкость.
9	Дискуссия	ПК-2	9. Методы молекулярной динамики.
10	Дискуссия	УК-1	10. Статистическое моделирование. Методы Монте-Карло.
11	Контрольная работа	ПК-2	11. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство (QSAR).
	Зачет с оценкой	ПК-2, УК-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.	
Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Семестр 7					
Текущий контроль					
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
Письменная 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
					8
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.	6
					11

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Зачет с оценкой	Обучающийся обнаружил всестороннее, систематическое и глубокое знание учебно-программного материала, умение свободно выполнять задания, предусмотренные программой, усвоил основную литературу и знаком с дополнительной литературой, рекомендованной программой дисциплины, усвоил взаимосвязь основных понятий дисциплины в их значении для приобретаемой профессии, проявил творческие способности в понимании, изложении и использовании учебно-программного материала.	Обучающийся обнаружил полное знание учебно-программного материала, успешно выполнил предусмотренные программой задания, усвоил основную литературу, рекомендованную программой дисциплины, показал систематический характер знаний по дисциплине и способен к их самостоятельному пополнению и обновлению в ходе дальнейшей учебной работы и профессиональной деятельности.	Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по профессии, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой, знаком с основной литературой, рекомендованной программой дисциплины, допустил погрешности в ответе на экзамене и при выполнении экзаменационных заданий, но обладает необходимыми знаниями для их устранения под руководством преподавателя.	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

История и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования.

Области применения компьютерного моделирования. Достижения современной науки.

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. Письменная 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
12. Решение уравнения Рутаана-Холла

5. Дискуссия

Тема 5

Теория функционала плотности

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

фазовая стабильность, электрические свойства, термомеханические свойства, магнитные свойства

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 EAM-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

оптические свойства, транспортные характеристики.

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. Письменная работа

Тема 8

Определение точности, время- и ресурсоемкости при выполнении ab-initio расчетов.

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

Метод молекулярной динамики. Теоретические основы. Уравнения движения. Интегрирование уравнений движения. Краевые условия. Основные этапы моделирования.

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

Метод Монте-Карло моделирования. Виды и модификации. Обратный метод Монте-Карло моделирования. Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы.

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. Контрольная работа

Тема 11

Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования.

Статистическая трактовка. Расчет парной корреляционной функции. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе.

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 с оценкой

Вопросы к зачету с оценкой:

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
Семестр 7			

Форма контроля	Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	Этап	Количество баллов
Текущий контроль			
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	6
		2	6
		3	6
		5	4
		7	4
		9	4
		10	4
Письменная работа	Обучающиеся получают задание по освещению определённых теоретических вопросов или решению задач. Работа выполняется письменно и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	4	4
		8	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.	6	4
		11	4
Зачет с оценкой	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:

Булавин, Л.А. Компьютерное моделирование физических систем: Учебное пособие [Электронный ресурс] / Л.А. Булавин, Н.В. Выгорницкий, Н.И. Лебовка. - Долгопрудный: Интеллект, 2011. - 352 с.: 60x90 1/16. (обложка) ISBN 978-5-91559-101-0, 1000 экз. URL: <http://znanium.com/catalog/product/398942>

Власов, М.П. Прикладная математика и информатика Моделирование экономических систем и процессов: Учебное пособие [Электронный ресурс] / М.П. Власов, П.Д. Шимко. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат). (переплет) ISBN 978-5-16-005560-2, 500 экз. URL: <http://znanium.com/catalog/product/344989>

Градов, В.М. Компьютерное моделирование: Учебник [Электронный ресурс] / В.М. Градов, Г.В. Овечкин, П.В. Овечкин, И.В. Рудаков - М.: КУРС: ИНФРА-М, 2017. - 264 с. URL: <http://znanium.com/catalog/product/603129>

7.2. Дополнительная литература:

Тимофеев, С.М. 3ds Max 2011: Практическое руководство [Электронный ресурс] / С.М. Тимофеев - СПб: БХВ-Петербург, 2010. - 499 с. ISBN 978-5-9775-0556-7 URL: <http://znanium.com/catalog/product/351140>

Немцова, Т.И. Компьютерная графика и web-дизайн: Учебное пособие [Электронный ресурс] / Т.И. Немцова, Т.В. Казанкова, А.В. Шнякин. - М.: ИД

ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 400 с. + CD-ROM: 60x90 1/16. - (Профессиональное образование). ISBN 978-5-8199-0593-7, 500 экз. URL: <http://znanium.com/catalog/product/458966>

Смирнова, Л.Э. История и теория дизайна [Электронный ресурс] / Л.Э. Смирнова - Краснояр.: СФУ, 2014. - 224 с.: ISBN 978-5-7638-3096-5 URL: <http://znanium.com/catalog/product/550383>

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

Васп - <http://www.vasp.at/>

Лампс - <http://lammmps.sandia.gov>

Лекция Оранова - <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	Лекция - это логически стройное, системное, глубокое и ясное изложение учебного материала. Назначение современной лекции в учебном процессе не в том, чтобы предоставить всю информацию по теме, а чтобы помочь освоить фундаментальные проблемы курса, овладеть методами научного познания, предложить новейшие достижения научной мысли. В учебном процессе лекция выполняет методологическую, организационную и информационную функции. В ряде случаев лекция является основным источником информации, например, при отсутствии учебников, учебных пособий по новым курсам. Лекция раскрывает понятийный аппарат конкретной области знания, ее проблемы, дает цельное представление о предмете, показывает взаимосвязь с другими дисциплинами. Все другие формы учебных занятий - семинары, лабораторные занятия, курсовое и дипломное проектирование, учебная практика, консультации, зачеты и экзамены - связаны с лекцией, опираются на фундаментальные положения и выводы.
практические занятия	Термин практическое занятие используется в педагогике как родовое понятие, включающее такие виды, как лабораторную работу, упражнение, семинар в его разновидностях. Аудиторные практические занятия играют исключительно важную роль в выработке у студентов навыков применения полученных знаний для решения практических задач в процессе совместной деятельности с преподавателями. Практические занятия служат своеобразной формой осуществления связи теории с практикой. Структура практических занятий в основном одинакова - вступление преподавателя, вопросы студентов по материалу, который требует дополнительных разъяснений, собственно практическая часть, заключительное слово преподавателя. Разнообразие возникает в основной, собственно практической части, включающей рефераты, доклады, дискуссии, тренировочные упражнения, решение задач, наблюдения, эксперименты и т. д. Опыт показывает, что нельзя на практических занятиях ограничиваться выработкой только практических навыков, техникой решения задач, построения графиков и т. п. Студенты должны всегда видеть ведущую идею курса и связь ее с практикой. Цель занятий должна быть понятна не только преподавателю, но и студентам. Это придает учебной работе жизненный характер, утверждает необходимость овладения опытом профессиональной деятельности, связывает их с практикой жизни.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная учебная работа представлена такими формами учебного процесса, как лекция, семинар, практические и лабораторные занятия, экскурсии, подготовка к ним. Студент должен уметь вести краткие записи лекций, составлять конспекты, планы и тезисы выступлений, подбирать литературу и т.д.</p> <p>Научная самостоятельная работа студента заключается в его участии в работе кружков на кафедрах, в научных конференциях разного уровня, а также в написании контрольных, историй болезни, курсовых и выпускных квалификационных (дипломных работ) работ.</p> <p>Положительное значение научной работы проявляется в ряде обстоятельств:</p> <ul style="list-style-type: none"> - будущие специалисты участвуют в процессе добывания новых знаний; - приобретаемые знания становятся прочными и целенаправленными; - студенты видят практические плоды своего труда, что эффективно стимулирует их дальнейшую деятельность; - приобретаются начальные навыки в научном исследовании. <p>Различают следующие уровни самостоятельной работы студента: низкий, средний, высокий. Для каждой специальности и дисциплины разрабатываются свои критерии оценки данных уровней. Ведущими путями самостоятельной работы студентов являются репродуктивный, самостоятельный и поисковый. Мотивы самообразования:</p> <ul style="list-style-type: none"> - стихийные, неустойчивые (любопытность, интерес к предмету, ко всему окружающему); - познавательные (рост самообразования); - социально - значимые (связанные с реализацией идеалов и жизненных планов, призвания). <p>Различают следующие характеры знаний:</p> <ul style="list-style-type: none"> - локальный (не объединяются с другими, быстро забываются ? возрастает удельный вес знаний, улучшается их качество); - целостный (знания глубокие, прочные, разносторонние, универсальные). <p>Умения работать с источниками:</p> <ul style="list-style-type: none"> - не систематизированы; студенты много читают, обращаются к дополнительной литературе эпизодично; - систематизированы: чтение вдумчивое; отмечается главное; делаются выписки; - рациональное применение различных источников информации: анализирует, соотносит с поставленными целями и задачами.
дискуссия	<p>Дискуссия - целенаправленный и упорядоченный обмен идеями, суждениями, мнениями в группе ради формирования мнения каждым участником или поиска истины. В настоящее время она является одной из важнейших форм образовательной деятельности, стимулирующей инициативность учащихся, развитие рефлексивного мышления. В отличие от обсуждения как обмена мнениями, дискуссией называют обсуждение-спор, столкновение точек зрения, позиций и т.д. Но ошибочно считать, что дискуссия - это целеустремленное, эмоциональное, заведомо пристрастное отстаивание уже имеющейся, сформированной и неизменной позиции.. Она возникает, когда перед людьми стоит вопрос, на который нет единого ответа. В ходе ее люди формулируют новый, более удовлетворяющий все стороны ответ на стоящий вопрос. Результатом ее может быть общее соглашение, лучшее понимание, новый взгляд на проблему, совместное решение.</p> <p>Важность регулярного использования дискуссии на учебных занятиях в настоящее время не оспаривается никем. Для прочного усвоения знаний и понимания возможности их использования в практической деятельности необходимо не просто прочитать и выучить материал, но и обязательно обсудить его с другим человеком.</p>
письменная работа	<p>Вид самостоятельной работы, выполняемой учащимися по заданию и под руководством преподавателя или самостоятельно. Наиболее простым видом письменной работы является списывание, которое позволяет овладеть навыками письма. Большую группу письменных работ составляют тренировочные работы, например, упражнения на применение грамматических форм или употребление лексических единиц. Воспитанию культуры умственного труда способствуют конспектирование, аннотирование. Эффективность письменной работы зависит от того, насколько ясно сформулирована цель задания и в какой мере оно усиленно учащемуся.</p>

Вид работ	Методические рекомендации
контрольная работа	<p>Контрольная работа - документ, представляющий собой форму отчётности по самостоятельной работе студентов заочной формы обучения в процессе изучения конкретной учебной дисциплины.</p> <p>Домашняя контрольная работа, выполняемая обучающимися заочной формы обучения, является основной формой самостоятельной работы в межсессионный период и средством контроля выполнения ими учебного плана и усвоения учебного материала в объёме рабочей программы дисциплины.</p> <p>В процессе выполнения контрольной работы студент должен:</p> <ul style="list-style-type: none"> уметь подбирать и анализировать литературу, выбирать наиболее существенный материал; отрабатывать навыки логически последовательного и грамотного изложения своих мыслей; приобретать навыки работы с нормативными документами; закреплять и углублять пройденный материал по изучаемой дисциплине. <p>Контрольная работа предназначена для студентов заочной формы обучения и позволяет увеличить объём знаний путем самостоятельного изучения дополнительного материала и проверки уже полученных знаний. В ходе подготовки к контрольной работе рекомендуется использовать данный УМК по дисциплине.</p>
зачет с оценкой	<p>Обычно зачет проводится по итогам семестра перед сессией в письменной или устной форме, причем преподаватель может включать в него вопросы как практических занятий, так и лекционных (что особенно уместно, когда по данному предмету не сдается экзамен). Главное отличие зачета от экзамена ? почти всегда не пяти-, а двухбалльная система оценки (сдал ? не сдал), что делает его получение несколько более простым делом. С другой стороны, порой процедура его сдачи достаточно сложна, а иногда применяется и пятибалльная оценка (так называемый дифференцированный зачет). Таким образом, для сдачи зачета необходимо, прежде всего, выполнить все требования преподавателя, что предполагает знание этих требований. Нужно как можно раньше выяснить, какие вопросы предстоит готовить и каковы правила самой процедуры (учитывается ли посещаемость, надо ли пропущенные занятия отрабатывать, а если надо, то каким образом и т.д.). Практика показывает, что хорошее посещение занятий является почти полной гарантией получения зачета, так как тогда можно быть в курсе всех требований преподавателя. И, напротив, большое количество пропусков может осложнить жизнь даже сильному студенту. Кроме того, необходимо учитывать, что проблемы могут появиться при распространенном подходе студента к практическим занятиям, когда многие работают первые месяцы вполсилы, накапливая задолженности по выполнению рефератов, практических заданий, конспектов и пр., а перед сессией пытаются все это сделать за одну неделю. Старайтесь распределять силы равномерно по всей дистанции семестра, и тогда зачетная неделя перед сессией будет не самой напряженной, а самой разгрузочной;</p>

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 "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

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:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

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 - аудально;
- 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 12.03.04 "Биотехнические системы и технологии" и профилю подготовки не предусмотрено .