

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Методы компьютерного моделирования жидкостей

Код модуля
1156742(1)

Модуль
Математическое моделирование физико-
химических процессов

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Добросердова Алла Борисовна	кандидат физико-математических наук, без ученого звания	Доцент	теоретической и математической физики
2	Новак Екатерина Владимировна	кандидат физико-математических наук, доцент	Доцент	теоретической и математической физики
3	Пьянзина Елена Сергеевна	кандидат физико-математических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра теоретической и математической физики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Ю.Д. Маева

Авторы:

- Добросердова Алла Борисовна, Доцент, теоретической и математической физики
- Новак Екатерина Владимировна, Доцент, теоретической и математической физики
- Пьянзина Елена Сергеевна, Доцент, Кафедра теоретической и математической физики

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Методы компьютерного моделирования жидкостей**

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	2	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции	
3.	Промежуточная аттестация	Зачет	
4.	Текущая аттестация	Домашняя работа	1
		Реферат	1

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Методы компьютерного моделирования жидкостей**

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-2 -Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов	Домашняя работа Зачет Лекции Реферат

	<p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p>	
<p>ОПК-3 -Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p> <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Зачет</p> <p>Реферат</p>
<p>ПК-5 -Способен разрабатывать непротиворечивые и полные модели в конкретной области профессиональной деятельности, формулировать цели, задачи их исследования, выбирать</p>	<p>З-3 - Определять методики построения моделей исследуемых процессов, явлений и объектов</p> <p>П-3 - Иметь практический опыт самостоятельной исследовательской деятельности, требующей широкого образования в соответствующем направлении</p> <p>У-4 - Определять оптимальные методы проведения</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Зачет</p> <p>Лекции</p> <p>Реферат</p>

обоснованные методы их анализа и изучения	компьютерных экспериментов и наблюдений	
ПК-6 -Способен анализировать и обосновывать адекватность математических моделей	3-3 - Идентифицировать современные методы визуализации данных	Зачет Лекции Реферат

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 1		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>домашняя работа</i>	2,17	30
<i>реферат</i>	2,17	70
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.6		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.4		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – не предусмотрено		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		

Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено		

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов.

	<p>Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения.</p> <p>Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.</p>
--	---

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Домашняя работа

Примерный перечень тем

1. Метод молекулярной динамики: алгоритм Верле.

Примерные задания

Необходимо изучить схему алгоритма Верле, представить ее в качестве блок-схемы.

Затем реализовать данный алгоритм на высокоуровневом языке программирования (Python, C++ и т.д.). Отладить работу программы, протестировать при различных параметрах (учитывая физические ограничения на исследуемую систему).

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Реферат

Примерный перечень тем

1. Написание скриптов на языке bash;

2. Компьютерное моделирование простейшей физической системы методом молекулярной динамики в программной среде ESPResSo;

3. Изучение основных потенциалов взаимодействий;

4. Периодические граничные условия;

5. Исследование трехмерных и двумерных систем;

6. Построение радиальной функции распределения;

7. Применение программы VMD для визуализации исследуемых систем;

8. Запись коротких видео-роликов с помощью программы VMD;

9. Метод Монте-Карло: алгоритм Метрополиса.

Примерные задания

Реферат должен содержать не менее 15 страниц текст, включая рисунки. Общий объем рисунков не должен превышать 20% от общего объема реферата. Каждый рисунок должен занимать не более одной трети листа А4. Большие блок-схемы или рисунки должны быть оформлены как отдельные приложения. Обязательно наличие титульного листа, листа с содержанием и списка литературы. Основное содержание предпочтительно разбить на 3-4 часть (например, История вопроса, Текущее положение дел, Пути развития и перспективы). Список литературы должен содержать не менее 5 источников, обязательна ссылка хотя бы на одну книгу и две статьи. Раз-мер листа реферата – А4, шрифт Times New Roman, 12-14 пт, межстрочный интервал – полу-торный, поля – слева – 2 см, остальные – 0.5. Обязательна проверка в системе Антиплагиат, оригинальность текста должна составлять не менее 60%.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Компьютерное моделирование простейшей физической системы методом молекулярной динамики;
 2. Потенциал Леннард-Джонса;
 3. Потенциал Кулона;
 4. Потенциал FENE;
 5. Метод dipolar P3M;
 6. Применение периодических граничных условий при компьютерном моделировании методом молекулярной динамики;
 7. Радиальная функция распределения;
 8. Уравнения движения, уравнения Ланжевена;
 9. Алгоритм Верле;
 10. Скоростной алгоритм Верле;
 11. Метод Монте-Карло: алгоритм Метрополиса.
- LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.