

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Методы молекулярной динамики

Код модуля
1159243(0)

Модуль
Специальные главы математики

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Байтимиров Дамир Рафисович	кандидат физико-математических наук, без ученого звания	Доцент	Физики высокоэнергетических процессов

Согласовано:

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

Авторы:

- Байтимиров Дамир Рафисович, Доцент, Физики высокоэнергетических процессов

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Методы молекулярной динамики

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

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Методы молекулярной динамики

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
ПК-4 -Способен самостоятельно осваивать и применять современные математические методы исследования, анализа и обработки данных, научно-исследовательскую, измерительно-аналитическую и технологическую аппаратуру в области ядерной физики и технологий	З-1 - Формулировать научную проблематику в области ядерной физики и технологий З-2 - Характеризовать цели и задачи производимых исследований З-3 - Описывать методы и средства математической обработки результатов расчетных и экспериментальных данных П-1 - Обоснованно предлагать новые направления исследований и анализа в области ядерной физики и технологий П-2 - Иметь практические навыки экспертной оценки результатов исследовательских работ и применения	Домашняя работа Зачет Лекции Практические/семинарские занятия

	<p>современных методов исследования</p> <p>У-1 - Анализировать новую научную проблематику соответствующей области знаний</p> <p>У-2 - Применять методы математической и графической обработки результатов исследования, анализа и обработки данных</p>	
<p>ПК-6 -Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок</p>	<p>З-1 - Характеризовать методы, средства и практику планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок в области ядерной физики и технологий</p> <p>З-2 - Определять порядок проведения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ</p> <p>П-1 - Организовать или участвовать в организации внедрения результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области ядерной физики и технологий</p> <p>У-1 - Применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок в области ядерной физики и технологий</p> <p>У-2 - Пользоваться методами учета и оценки погрешностей экспериментальных данных</p>	<p>Домашняя работа</p> <p>Зачет</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p>

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 – 0.5		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Активность на занятиях</i>	3,8	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.5		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.5		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.5		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Домашняя работа</i>	3,12	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 1		
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. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

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)	Шкала оценивания	
		Традиционная характеристика уровня	Качественная характеристика уровня

	задание)			
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)

5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Обзор готовых программных кодов в открытом до- ступе. Установка LAMMPS
2. Выполнение элементарных расчетов для систем с размером 8*8 элементарных ячеек и временем релаксации 1 Пс.
3. Выполнение расчета кривой плавления с подбором потенциала и выбором термостата на ПК
4. Написание рабочего программного кода на любом современном языке программирования.
5. графическая и численная интерпретация результа- та проведенных расчетов. Оценка правильности.

LMS-платформа – не предусмотрена

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. Написание программного кода для расчета на любом языке программирования 2. Выполнение элементарного расчета на ПК. 3. Выбор потенциала взаимодействия в зависимости от типа задачи 4. Интерпретация и проверка полученных результатов

Примерные задания

1. Расчет кривой плавления меди методом молекулярной динамики в ГЦК решетке. Произвести расчеты с разными размерами элементарной ячейки и разным количеством шагов. Сделать выводы. Подобрать оптимальные начальные условия для получения физического результата.

2. Расчет равновесных параметров фазового перехода 1 рода для ГЦК решетки меди методом молекулярной динамики в периодических граничных условиях.

Произвести расчет двумя произвольными методиками и сделать сравнительную характеристику. Определить границы применимости использованных методов расчета.

LMS-платформа – не предусмотрена

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

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Моделирование молекулярной динамики, идейные основы и возможности компьютерной реализации. 2. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярных взаимодействий. 3. Уравнения движения молекулярной системы. Их разностная аппроксимация (алгоритмы: Верле, leap-frog Верле, скоростной Верле). 4. Моделирование динамики конденсированных систем. Периодические граничные условия 5. Алгоритм Верле (составление списка соседей) для вычисления невалентных взаимодействий. 6. Алгоритм сканирования для нахождения ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Оценка быстродействия. 7. Температура. Термостатирование молекулярной системы (масштабирование скоростей; термостат Берендсена; термостат Нозе-Гувера; стохастическая динамика; столкновительный термостат). 8. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика. 9. Вычисление давления в малых молекулярных системах. Баростат Берендсена. Другие виды термостатов. 10. Общая схема молекулярно-динамического вычислительного эксперимента

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.