

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Моделирование динамики атомов в наноматериалах

Код модуля
1154783(1)

Модуль
Компьютерное моделирование наноматериалов

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Ремпель Андрей Андреевич	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	физических методов и приборов контроля качества

Согласовано:

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

Авторы:

- Ремпель Андрей Андреевич, Профессор, физических методов и приборов контроля качества

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Моделирование динамики атомов в наноматериалах

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Лабораторные занятия
3.	Промежуточная аттестация	Зачет
4.	Текущая аттестация	Отчет по лабораторным работам 1

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Моделирование динамики атомов в наноматериалах

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 самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности З-2 - Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи,	Зачет Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам

	<p>относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>У-2 - Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p>	
<p>ОПК-3 -Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов</p>	<p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</p> <p>З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>З-4 - Перечислить основные нормативные документы, регламентирующие оформление научно-технических отчетов и защиту прав интеллектуальной собственности</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>

	<p>изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>П-2 - Оформить научно-технический отчет, публикацию научных результатов, документы защиты интеллектуальной собственности в соответствии с нормативными требованиями</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности</p> <p>У-3 - Оценивать оформление научно-технических отчетов, публикаций научных результатов, документов защиты интеллектуальной собственности на соответствие нормативным требованиям</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 – 0.4		
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 – 0.4		
Промежуточная аттестация по лекциям – зачет		

Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6		
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 – 0.6		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Отчет по лабораторным работам</i>	3,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -1		
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 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)

5.1.2. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Поточковые параллельные вычисления при физическом моделировании
 2. Применение графических процессоров на примере сложения матриц.
 3. Применение графических процессоров на примере перемножения матриц
 4. Численные методы интегрирования уравнений движения при молекулярно-динамическом моделировании.
 5. Распараллеливание молекулярной динамики для расчёта на графических процессорах.
 6. Вычисление интегралов методом Монте-Карло.
 7. Стохастическое моделирование миграции нейтронов в веществе
- 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. Отчет по лабораторным работам

Примерный перечень тем

1. Алгоритм параллельной реализации молекулярной динамики с использованием разделяемой памяти графических процессоров архитектуры
2. Параллельная реализация алгоритма Scan с использованием разделяемой памяти графических процессоров архитектуры CUDA.

Примерные задания

- Создать модельный нанокристалл из 512 одинаковых частиц, расположенных в узлах простой кубической решетки. Задать потенциалы взаимодействия, описывающие взаимодействие атомов аргона.

Реализовать и провести параллельное молекулярно-динамическое моделирование этой системы до формирования равновесной конфигурации.

- Создать модельный нанокристалл из 4096 одинаковых частиц, расположенных в узлах простой кубической решетки. Задать потенциалы взаимодействия, описывающие взаимодействие ксенона.

Окружить нанокристалл сферой, отражающей атомы, перешедшие в газовую фазу. Реализовать параллельное молекулярно-динамическое моделирование этой системы, изучить посредством моделирования зависимость её состояния от температуры.

- Создать массив из случайных чисел, равномерно распределенных от 0 до 1, размером $2S$, где S – целое число от 5 до 10. Найти сумму элементов этого массива с использованием параллельного алгоритма Scan.

- Создать массив из произвольных размером $2S$, где S – целое число от 10 до 20. Сравнить скорости последовательного суммирования этого массива и суммирования с использованием параллельного алгоритма Scan.

LMS-платформа – не предусмотрена

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

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Программирование графических процессоров архитектуры CUDA на примере вычисления потока нейтронов через пластину методом Монте-Карло.

2. Программная модель CUDA: вычислительное ядро, вычислительные потоки и блоки, взаимодействие центрального и графического процессоров.

3. Общие принципы распараллеливания вычислений по данным, по инструкциям и по задачам. Особенности параллельных вычислительных систем с точки зрения реализации этих принципов.

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.