

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Метод молекулярной динамики

**Код модуля**  
1153279(1)

**Модуль**  
Моделирование реальных процессов

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико-математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Т.Г. Комарова

**Авторы:**

- Мазуренко Владимир Владимирович, Заведующий кафедрой, теоретической физики и прикладной математики

**1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Метод молекулярной динамики**

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 Метод 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
ОПК-4 -Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности	З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий и баз данных У-1 - Выбирать и использовать современные ИТ-технологии и базы данных при сборе,	Зачет Лабораторные занятия Лекции Отчет по лабораторным работам

	анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-2 -Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <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>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>
УК-3 -Способен организовать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели	<p>Д-2 - Демонстрировать умение эффективно работать в команде</p> <p>З-3 - Характеризовать виды командных стратегий, факторы формирования успешной команды для эффективной деятельности</p> <p>П-2 - Обосновать выбор членов команды и распределения полномочий (функций) ее членов, координировать взаимодействия членов команды</p> <p>У-3 - Анализировать виды командных стратегий для достижения целей работы команды</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>
УК-2 -Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	<p>Д-2 - Демонстрировать способность убеждать, аргументировать свою позицию</p> <p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>

	<p>профессиональной деятельности</p> <p>П-2 - Выбирать оптимальные способы решения конкретных задач проекта на каждом этапе его реализации на основе анализа и оценки рисков и их последствий с учетом ресурсов и ограничений</p> <p>У-3 - Анализировать и оценивать риски и результаты проекта на каждом этапе его реализации и корректировать проект в соответствии с критериями, ресурсами и ограничениями</p>	
<p>ПК-2 -Способен осуществлять эффективное управление разработкой программных средств и проектов</p>	<p>З-2 - Классифицировать типовые решения, библиотеки программных модулей, шаблоны, классы объектов, используемые при разработке программного обеспечения</p> <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-2 - Применять методы и средства разработки программного обеспечения, баз данных, программных интерфейсов</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>
<p>ПК-3 -Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок</p>	<p>З-1 - Сделать обзор характеристик научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации</p> <p>З-2 - Изложить порядок оформления научно-технической документации и заявок на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы,</p>	<p>Зачет</p> <p>Лабораторные занятия</p> <p>Лекции</p> <p>Отчет по лабораторным работам</p>

	собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ У-1 - Выбирать методы и средства проведения исследований и разработок с учетом специфики поставленной задачи	
--	---	--

### 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

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.5</b>		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>активность студента на аудиторных занятиях</i>	3,16	100
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – <b>0.4</b>		
Промежуточная аттестация по лекциям – <b>зачет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – <b>0.6</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – не предусмотрено</b>		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – <b>не предусмотрено</b>		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – <b>нет</b>		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – <b>не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – 0.5</b>		
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 – <b>1</b>		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – <b>нет</b>		

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

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

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

## 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

<b>Результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам</b>
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. Построение фазовых портретов и сечений Пуанкаре с помощью программы Phaser
2. Моделирование нерегулярной динамики в трехмерном фазовом пространстве (модели Лоренца, Ресслера, Дуффинга)
3. Приближенная аналитическая теория хаотического аттрактора отображения Хенона
4. Вычисление максимального показателя Ляпунова для модели Лоренца и модели Хенона
5. Последовательность удвоений периода и переход к хаосу  
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. Двумерная жидкость
2. Двумерная квадратная решетка
3. Вакансии в двумерных решетках. Квадратная решетка.
4. Двумерный газ с разными типами атомов

Примерные задания

Исследовать зависимость среднеквадратичного смещения и парной корреляционной функции от плотности жидкости и температуры.

Разработать программу молекулярной динамики для симуляции двумерной системы частиц, взаимодействующих через потенциал Леннарда-Джонса

LMS-платформа – не предусмотрена

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

#### **5.3.1. Зачет**

Список примерных вопросов

1. Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин
2. Классические уравнения движения и методы их численного интегрирования.
3. Модель парных потенциалов.
4. Многочастичные потенциалы для металлов
5. Многочастичные потенциалы для полупроводников
6. Молекулярная динамика Кара-Паринелло
7. Силы в «первопринципных» молекулярно-динамических расчетах
8. Теория функционала электронной плотности

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.