

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра нанотехнологий и микросистемной техники

Авторы-составители: **Волынцев Анатолий Борисович**

Рабочая программа дисциплины

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Код УМК 87746

Утверждено
Протокол №9
от «13» мая 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Компьютерные технологии в научных исследованиях

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в базовую часть Блока « М.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **28.04.01** Нанотехнологии и микросистемная техника
направленность Материалы микро- и наносистемной техники

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Компьютерные технологии в научных исследованиях** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность : Материалы микро- и наносистемной техники)

ОПК.5 Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов

Индикаторы

ОПК.5.1 Использует знания профессионального профиля для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника (направленность: Материалы микро- и наносистемной техники)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	1
Объем дисциплины (з.е.)	6
Объем дисциплины (ак.час.)	216
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	72
Проведение лекционных занятий	24
Проведение практических занятий, семинаров	48
Самостоятельная работа (ак.час.)	144
Формы текущего контроля	Защищаемое контрольное мероприятие (3)
Формы промежуточной аттестации	Экзамен (1 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Раздел 1. Соотношение между натурным и вычислительным экспериментами.

Когда необходим вычислительный эксперимент. Дается обзор ситуаций, когда натурный эксперимент либо невозможен по техническим причинам в силу отсутствия самой возможности произвести требуемые измерения (сверхбыстрые процессы, опасные условия эксперимента, принципиальное отсутствие экспериментальных методик для регистрации исследуемых параметров) или по причинам принципиальной невозможности реализации натурального эксперимента. Соотношение между вычислительным и натурным экспериментом в постановочной части задачи. Соотношение между формулировкой задач натурального и вычислительного экспериментов в части их условий, как начальных, так и по ходу реализации всего эксперимента натурального и численного. Сопоставление выбора экспериментальной техники натурального эксперимента и вычислительных методик численного эксперимента. Сопоставление методов контроля достоверности натурального и вычислительного экспериментов, основные подходы. Суперкомпьютерные технологии, используемые в медицине, биологии, метеорологии, квантово-механических расчетах наноструктур, инженерных задачах авиа- и ракетостроения, строительстве и геологии.

Раздел 2. Компьютерное моделирование процессов, реализующихся на атомно-молекулярном уровне.

Основные принципы методов молекулярной динамики. Основные подходы и круг задач, решаемых с помощью методов молекулярной динамики. Потенциалы парного взаимодействия, выбор вида этих потенциалов и определение их численных параметров. Варианты начальных и граничных условий. Учет тепловых колебаний. Примеры реализации метода молекулярной динамики. Моделирование дефектов кристаллического строения: вакансия, межузельный атом, микропора (ядро краевой дислокации). Моделирование процессов облучения и ударного сжатия. Проверка устойчивости и сходимости результата путем вариации шага по времени, начальных условий. Методы контроля достоверности результатов вычислительного эксперимента.

Раздел 3. Компьютерное моделирование процессов в твердых телах, происходящих на мезоскопическом уровне.

Модели дискретного распределения дислокаций. Самодействие гибких дислокаций. Основные допущения модели жестких прямолинейных дислокаций. Начальные и граничные условия. Методы обеспечения корректности задачи (устойчивость решения и его единственность). Методы оценки корректности задачи и достоверности результатов расчета. Методы непрерывного распределения дислокаций. Основные допущения метода непрерывного распределения дислокаций. Расчет силового взаимодействия дислокаций применительно к циклическим граничным условиям. Методы обеспечения устойчивости решения и сходимости результатов. Примеры реализации метода непрерывного распределения дислокаций вязкоупругого поведения твердых тел в задачах наследственной механики и в экстремальных условиях ударно-импульсного воздействия.

Раздел 4. Представление научной информации.

Публикация результатов научных исследований. Электронная публикация. Современные системы публикации, базы данных научных статей. Язык Postscript. Системы для каталогизации научных публикаций. Импакт-фактор журнала. Индекс цитирования и индекс Хирша как методы оценки деятельности ученого. Системы расчета импакт-фактора и индекса Хирша. Российский индекс научного цитирования.

Раздел 5. Основные системы построения графической и текстовой информации.

Основные принципы визуализации. Примеры визуализации для различных физических задач. Программы для визуализации результатов физических исследований. Графопостроители Origin, Grapher,

Surfer, основные функции. Построение сложных графиков и подготовка графического материала в соответствии с требованиями научных издательств. Система автоматического построения графиков GNUPlot, ее основные возможности и оптимальные ситуации для применения. Статистический анализ экспериментальных данных, оценка погрешности измерения и ее отражение на графике.

Дополнительные функции текстового процессора MS Word. Общие требования к текстовым документам. ГОСТ 2.105-95. Использование стилей MS Word, верстка сложных документов.

Использование ссылок в MS Word, нумерация рисунков и таблиц. Применение внутренних и внешних баз данных литературных источников. Приведение документа MS Word в соответствие требованиям ГОСТ по оформлению текстовых документов, ЕСКД и ЕСТД.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Поршневу, С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB : учебное пособие / С. В. Поршневу. — 2-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 736 с. — ISBN 978-5-8114-1063-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система.
<https://elis.psu.ru/node/620008>
2. Зинюк, О. В. Компьютерные технологии. Часть 1. Обработка растровых изображений : учебное пособие / О. В. Зинюк. — Москва : Московский гуманитарный университет, 2011. — 80 с. — ISBN 978-5-98079-683-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]
<http://www.iprbookshop.ru/8608>
3. Зинюк, О. В. Компьютерные технологии. Часть 2. Обработка векторных изображений : учебное пособие / О. В. Зинюк. — Москва : Московский гуманитарный университет, 2011. — 96 с. — ISBN 978-5-98079-684-6. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт].
<http://www.iprbookshop.ru/8609>

Дополнительная:

1. Волынцев А. Б., Ратт А. В., Шилов А. Н. Компьютерное моделирование пластической деформации и дефектов в кристаллах: учебно-методическое пособие / А. Б. Волынцев, А. В. Ратт, А. Н. Шилов. — Пермь, 2012, ISBN 978-5-7944-1921-4, 2-е изд. — 1. <http://www.campus.psu.ru/library/node/23924>
2. Компьютерные технологии в высшем образовании. Т. 1. — М.: Изд-во МГУ, 1994, ISBN 5-211-03289-6. — 370
3. Волынцев А. Б. Наследственная механика дислокационных ансамблей компьютерные модели и эксперименты / А. Б. Волынцев. — Иркутск: Издательство Иркутского университета, 1990. — 288. — Библиогр.: с. 273-287
4. Беликова, Н. А. Математическое моделирование. Часть 2 : учебное пособие / Н. А. Беликова, В. В. Горелова, О. В. Юсупова. — Самара : Самарский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2009. — 64 с. — ISBN 978-5-9585-0359-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/20477>

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<http://www.iprbookshop.ru/63098.html> Компьютерные технологии в научных исследованиях

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Компьютерные технологии в научных исследованиях** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

- презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);
- доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС) ;
- доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

Перечень необходимого лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения:

1. Операционная система "ALT Linux".
2. Приложение позволяющее просматривать и воспроизводить медиаконтент PDF-файлов «Adobe Acrobat Reader DC».
3. Программы, демонстрации видео материалов (проигрыватель) «WindowsMediaPlayer».
4. Программа просмотра интернет контента (браузер) «Google Chrome» или аналогичных.
5. Офисный пакет приложений «LibreOffice».
6. Математический пакет программ MATLAB
7. Программа Fityk

При освоении материала и выполнении заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой или маркерной доской.

Практические занятия проходят в компьютерном классе, оснащенном персональными ЭВМ и соответствующим программным обеспечением. Состав оборудования определен в Паспорте компьютерного класса.

Текущий контроль осуществляется в аудитории, оснащенной меловой (и) или маркерной доской.

Групповые (индивидуальные) консультации проводятся в аудитории, оснащенной меловой (и) или маркерной доской.

К помещениям для самостоятельной работы студентов относятся:

- Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-

образовательную среду университета.

• Помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Компьютерные технологии в научных исследованиях**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ОПК.5

Способен использовать инструментарий формализации инженерных, научно-технических задач, прикладное программное обеспечение для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ОПК.5.1 Использует знания профессионального профиля для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов</p>	<p>Знать основные области применения компьютерных технологий: машиностроении, медицине, биологии, геологии, метеорологии, строительстве, нанотехнологиях. Владеть основными методами компьютерного моделирования реальной структуры твердых тел. Уметь использовать основные системы визуализации компьютерных исследований и их подготовки к публикации.</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает все основные области применения компьютерных технологий. Не владеет основными методами компьютерного моделирования реальной структуры твердых тел. Не умеет использовать основные системы визуализации компьютерных исследований и их подготовки к публикации.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Имеет существенные пробелы в знаниях об основных областях применения компьютерных технологий. Слабо владеет основными методами компьютерного моделирования реальной структуры твердых тел. Умеет использовать основные системы визуализации компьютерных исследований и их подготовки к публикации.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Имеет незначительные пробелы в знаниях об основных областях применения компьютерных технологий. Владеет основными методами компьютерного моделирования реальной структуры твердых тел. Умеет использовать основные системы визуализации компьютерных исследований и их подготовки к публикации.</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Знает все основные области применения компьютерных технологий. Владеет основными методами компьютерного моделирования реальной структуры твердых тел. Умеет использовать основные системы визуализации компьютерных исследований и их подготовки к публикации.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Экзамен

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 43 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 43 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ОПК.5.1 Использует знания профессионального профиля для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов	Раздел 2. Компьютерное моделирование процессов, реализующихся на атомно-молекулярном уровне. Защищаемое контрольное мероприятие	Знания о необходимости вычислительного эксперимента продиктованного невозможностью проведения эксперимента натурного. Примеры использования компьютерных технологий в биологии и медицине. Применение компьютерных технологий в машиностроении. Основные методические подходы. Применение компьютерных технологий в строительстве. Критерии оценки достоверности. Применение компьютерных технологий в метеорологии и геологии. Сопоставление с методами физического моделирования. Сопоставление методов контроля достоверности натурного и вычислительного экспериментов, основные подходы.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<p>ОПК.5.1 Использует знания профессионального профиля для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов</p>	<p>Раздел 3. Компьютерное моделирование процессов в твердых телах, происходящих на мезоскопическом уровне. Защищаемое контрольное мероприятие</p>	<p>Знания о потенциалах парного взаимодействия, выбор вида этих потенциалов и определение их численных параметров применительно к методам молекулярной динамики. Модели гибких и жестких дислокаций. Методы обеспечения корректности задачи в модели дискретного распределения дислокаций. Расчет силового взаимодействия дислокаций применительно к циклическим граничным условиям в модели непрерывного распределения дислокаций. Основные подходы и круг задач, решаемых с помощью методов молекулярной динамики. Основные допущения метода непрерывного распределения дислокаций.</p>
<p>ОПК.5.1 Использует знания профессионального профиля для моделирования и проектирования объектов, систем и процессов</p>	<p>Раздел 4. Представление научной информации. Защищаемое контрольное мероприятие</p>	<p>Знания об основных видах публикаций в научных исследованиях. Базы данных научных статей. Основные методы наукометрии. Основные системы используемые для построения сложного графического и текстового материалов. Оценка погрешности измерения и их визуализация.</p>

Спецификация мероприятий текущего контроля

Раздел 2. Компьютерное моделирование процессов, реализующихся на атомно-молекулярном уровне.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Сопоставление методов контроля достоверности натурального и вычислительного экспериментов, основные подходы.	7
Когда необходимость вычислительного эксперимента продиктована невозможностью проведения эксперимента натурального.	6
Применение компьютерных технологий в машиностроении. Основные методические подходы.	5

Применение компьютерных технологий в строительстве. Критерии оценки достоверности.	5
Примеры использования компьютерных технологий в биологии и медицине.	4
Применение компьютерных технологий в метеорологии и геологии. Сопоставление с методами физического моделирования.	3

Раздел 3. Компьютерное моделирование процессов в твердых телах, происходящих на мезоскопическом уровне.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **17**

Показатели оценивания	Баллы
Основные допущения метода непрерывного распределения дислокаций. Реализация метода непрерывного распределения дислокаций в задачах наследственной механики.	10
Расчет силового взаимодействия дислокаций применительно к циклическим граничным условиям в модели непрерывного распределения дислокаций.	8
Потенциалы парного взаимодействия, выбор вида этих потенциалов и определение их численных параметров применительно к методам молекулярной динамики.	8
Основные подходы и круг задач, решаемых с помощью методов молекулярной динамики.	7
Модели гибких и жестких дислокаций.	7

Раздел 4. Представление научной информации.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

Показатели оценивания	Баллы
Основные виды публикаций в научных исследованиях. Базы данных научных статей. Основные методы наукометрии.	13
Основные системы используемые для построения сложного графического и текстового материалов.	10
Оценка погрешности измерения и их визуализация.	7