

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Геолого-географический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан



П. А. Тишин



«30» июня 2022 г.

**Фонд оценочных средств  
по дисциплине**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИНЕРАЛЬНЫХ СИСТЕМ И  
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

Направление подготовки  
**05.04.01 Геология**

Направленность (профиль) подготовки:  
**«Эволюция Земли: геологические процессы и полезные ископаемые»**

Фонд оценочных средств соответствует ОС НИ ТГУ по направлению подготовки 05.04.01 Геология, учебному плану направления подготовки 05.04.01 Геология, направленности (профиля) «Эволюция Земли: геологические процессы и полезные ископаемые» и рабочей программе по данной дисциплине.

Полный фонд оценочных средств по дисциплине хранится на кафедре минералогии и геохимии.

Разработчики ФОС:


Лычагин Дмитрий Васильевич, заведующий кафедрой минералогии и геохимии геолого-географического факультета, профессор, доктор физико-математических наук.

Никонов Антон Юрьевич, доцент кафедры физики металлов физического факультета, кандидат физико-математических наук.

Экспертиза фонда оценочных средств проведена учебно-методической комиссией факультета, протокол № 6 от 24.06.2022 г.

Руководитель ОПОП

«Эволюция Земли: геологические процессы  
и полезные ископаемые»

 П.А. Тишин

## 1 Компетенции и результаты обучения, формируемые в результате освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-3 Способен самостоятельно обобщать результаты, полученные в процессе решения профессиональных задач, разрабатывать рекомендации их по практическому использованию

ПК-1 Способен решать стандартные и нестандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационных технологий, в т.ч. ГИС- и ГГИС-технологий.

Таблица 1 – Уровни освоения компетенций и критерии их оценивания

Компетенция	Индикатор компетенции	Результаты освоения дисциплины	Критерии оценивания результатов обучения			
			Допороговый	Пороговый	Достаточный	Повышенный
ОПК-3	ИОПК-3.1	Определяет критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач	Отсутствие умений определять критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач	Общие, но не структурированные умения определять критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы умения определять критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач	Сформированное умение определять критерии оценки и качество (качественные показатели) выполненных научных исследований / производственных работ (в соответствии с направленностью (профилем) магистратуры) в зависимости от поставленных задач
ПК-1	ИПК-1.2	На основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создает цифровые модели геологических объектов и процессов	Отсутствие умений на основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создавать цифровые модели геологических объектов и процессов	Общие, но не структурированные умения на основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создавать цифровые модели геологических объектов и процессов	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы умения на основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создавать цифровые модели геологических объектов и процессов	Сформированное умение на основе компьютерного комплексирования и обработки геологических данных создавать цифровые модели геологических объектов и процессов

ПК-1	ИПК-1.3	Проводит комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности	Отсутствие умений проводить комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности	Общие, но не структурированные умения проводить комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы умения проводить комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности	Сформированное умение проводить комплексный анализ и интерпретацию геологической модели с целью получения новых данных для решения задач профессиональной деятельности
------	---------	---	--	--	---	--

## 2 Этапы формирования компетенции в курсе и виды оценочных средств

№	Раздел дисциплины	Результаты освоения дисциплины	Оценочные средства
1	Тема 1. Метод молекулярной динамики: основные принципы	ИОПК-3.1	Задание
2	Тема 2. Вычислительный эксперимент: термодинамические, структурные и кинетические свойства системы	ИПК-1.2	Задание
3	Тема 3. Вычислительный эксперимент: практика	ИПК-1.3	задание

## 3 Типовые задания для проведения текущего контроля успеваемости по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и выполнения заданий на практических занятиях.

### ИОПК-3.1

Задание

Пример задания

Инициализация системы.  
Задание кристаллической решётки.  
Граничные условия.  
Создание моно- и поликристаллов.

### ИПК-1.2

Задание

Пример задания

Моделирование термического воздействия на кристаллические материалы. Анализ изменения внутренней структуры. Расчёт функции радиального распределения атомов.

### ИПК-1.3

Задание

Пример задания

Моделирование механического воздействия на материал.  
Одноосная деформация сжатия и растяжения.

Построение кривых деформации.

Анализ дефектов структуры.

Оценивание результатов освоения дисциплины в ходе текущего контроля происходит на основании критериев, обозначенных в таблице 1. Сводные данные текущего контроля успеваемости по дисциплине отражаются в электронной информационно-образовательной среде НИ ТГУ. Проверка уровня сформированности компетенций осуществляется в процессе промежуточной аттестации.

#### **4 Проверка сформированности компетенций в процессе промежуточной аттестации**

**Зачет в четвёртом семестре** проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос, проверяющий ИОПК 3.1 и задачу, проверяющую ИПК-1.2 и ИПК-1.3.

##### **Типовые задания для проведения промежуточной аттестации**

###### **ИОПК-3.1**

###### **Примерные вопросы**

1. Модель. Виды моделей. Основные требования, предъявляемые к моделям.
2. Алгоритмы интегрирования уравнений движения.
3. Расчёт внутренней энергии и температуры.
4. Расчёт энергии системы. Понятие равновесия системы.
5. Модели многоатомных систем. Основная идея молекулярной динамики.
6. Этапы моделирования в рамках метода МД. Гамильтониан моделируемой системы.
7. Описание взаимодействия между атомами.
8. Расчет свободной энергии Гельмгольца, энергии Гиббса, энтальпии, энтропии.
9. Расчёт коэффициента диффузии.
10. Анализ дефектов кристаллической решётки. Визуализация дефектов структуры.
11. Молекулярная динамика различных ансамблей.
12. Роль компьютерного эксперимента в статистической физике.

###### **ИПК-1.2**

###### **Пример задания**

Опишите взаимодействия между атомами в методе молекулярной динамики.

###### **ИПК-1.3**

###### **Пример задания**

Проведите расчёт энергии системы. При каких условиях будет достигнуто равновесие системы?

#### **5 Шкала формирования итоговой оценки**

Оценка	Критерии оценки
Зачтено	Задача решена верно или с незначительными замечаниями развернутый ответ на вопросы экзамена показал повышенный, достаточный, пороговый уровень освоения всех компетенций

Не зачтено	Задача не решена, нет ответа даже на общие вопросы допороговый уровень освоения всех компетенций
------------	--