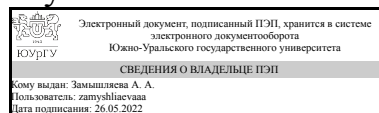


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



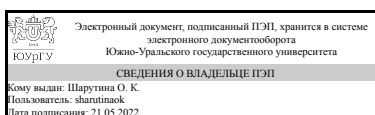
А. А. Замышляева

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.07.06 Цифровой двойник материалов  
для направления 22.06.01 Технологии материалов  
уровень аспирант тип программы  
направленность программы  
форма обучения очная  
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

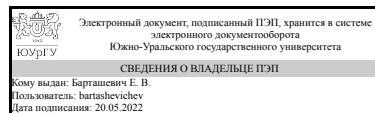
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 22.06.01 Технологии материалов, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 888

Зав.кафедрой разработчика,  
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,  
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

## 1. Цели и задачи дисциплины

Помочь овладеть новейшими знаниями в области систематической обработки и анализа цифровых моделей химических соединений, материалов, конечно-элементных моделей многокомпонентных систем с экспериментальными данными и спрогнозированными свойствами, что позволит осуществлять рациональное планирование и эффективную разработку новых функциональных материалов. методами, алгоритмами и инструментами моделирования структуры и особенностей строения химических соединений и наноматериалов, развить понятие "цифровой двойник материалов", научиться определяться с масштабным уровнем, необходимым на заданном этапе исследований свойств и построения прогнозов.

## Краткое содержание дисциплины

Дисциплина раскрывает современные проблемы создания цифровых двойников материалов, вопросы стыковки с новейшими информационными технологиями, актуальность вопросов архитектуры системы хранилищ и баз данных, автоматизированной передачи сырых данных и систематизации обрабатываемой информации о структуре и свойствах материалов и наноматериалов. Data Lake цифровых двойников материалов как агрегатор сырой и структурированной информации о материалах и химических соединениях с установленными взаимосвязями между структурой, свойствами, методологической базой.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ПК-7.2 способностью развивать методы и технологии цифровой обработки, анализа и хранения информации о структуре и свойствах химических соединений и наноматериалов	Знать: Принципы систематизации и хранения информации в химических и материаловедческих базах данных.
	Уметь: Работать с базами данных Materials Project, NOMAD как на предмет поиска, так и депонирования информации о свойствах цифровых структурных моделей
	Владеть: Проведением компьютерного моделирования, обработки, анализа и подготовкой к хранению результатов расчетов и эксперимента для химических соединений и наноматериалов
УК-4 готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	Знать: Принципы систематизации и хранения информации в химических и материаловедческих базах данных.
	Уметь: Работать с базами данных Materials Project, NOMAD как на предмет поиска, так и депонирования информации о свойствах цифровых структурных моделей.
	Владеть: Проведением компьютерного моделирования, обработки, анализа и подготовкой к хранению результатов расчетов и эксперимента для химических соединений и наноматериалов.

### 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
П.1.В.06.06 Многомасштабное моделирование материалов	Производственная (по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности) практика (6 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
П.1.В.06.06 Многомасштабное моделирование материалов	Знать: основы квантово-химических расчетов, молекулярной механики и молекулярной динамики, теорию химической связи, принципы построения структурных моделей атомно-молекулярных систем, наноматериалов. Уметь производить квантово-химические расчеты методами Хартри-Фока и Кона-Шема. Владеть навыками формирования входных файлов и обработки выходных данных, получаемых в ходе компьютерного моделирования.

### 4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		5
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108
<i>Аудиторные занятия:</i>	38	38
Лекции (Л)	38	38
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	70	70
Подготовка к текущему контролю. Работа с поисковыми системами Materials Project, NOMAD, Open Quantum Materials Database.	36	36
Написание реферата	34	34
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

### 5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах
-----------	----------------------------------	---

		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Data Lake и базы-агрегаторы модельных данных о материалах с возможностью анализа расчетных характеристик и построения достоверных прогнозов.	24	24	0	0
2	Data Lake и базы данных экспериментальных свойств химических соединений и материалов	14	14	0	0

## 5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1-2	1	Понятие Data Lake и "Цифровой двойник материала"	4
3-4	1	Агрегация модельных данных о материалах с возможностью анализа расчетных характеристик	4
5-6	1	Агрегация модельных данных о материалах с возможностью построения достоверных прогнозов	4
7-8	1	Программное обеспечение для управления большими данными. Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров.	4
9-10	1	NOMAD. Хранение, депонирование, анализ, поиск расчетных данных по составу, структуре, строению, спектрам	4
11-12	1	Materials Project. Хранение и поиск свойств преимущественно неорганических соединений на основе расчетных данных.	4
13-14	2	Crystallography Open Database, CCSD	4
15-16	2	Системы фильтров входного блока в Data Lake	4
17-19	2	Коллекция графических результатов электронной микроскопии и экспорт измеренных спектральных данных.	6

## 5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

## 5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

## 5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к текущему контролю. Работа с поисковыми системами Materials Project, NOMAD, Open Quantum Materials Database.	Руководство к использованию (мануал) Materials Project, Руководство к использованию (мануал) NOMAD, Руководство к использованию (мануал) Open Quantum Materials Database	36
Подготовка реферата.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория	34

	знаний, 2014. гл. 1-3. Периодические научные издания: Соломатов В.И. Развитие полиструктурной теории композиционных строительных материалов Текст. / В.И. Соломатов // Известия вузов. Архитектура и строительство. -1985. № 8. - С. 44-53.	
--	---	--

## 6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Не предусмотрены

## Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Инновационные формы обучения	Краткое описание и примеры использования в темах и разделах
Дискуссии и семинары с приглашенными учеными из UCF (Университет Центральной Флориды) и ИОС УрО РАН	Оборудование и ПО для обработки и хранения информации

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: 1. Государственное задание 2020073-ГЗ №0853-2020-0019 Наименование темы: На пути к новым гибридным материалам: цифровое моделирование структуры и свойств от атомно-молекулярного уровня до наночастиц.

## 7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Все разделы	ПК-7.2 способностью развивать методы и технологии цифровой обработки, анализа и хранения информации о структуре и свойствах химических соединений и наноматериалов	Текущий - проверка подготовленных файлов с расчетными данными	1
Все разделы	ПК-7.2 способностью развивать методы и технологии цифровой обработки, анализа и хранения информации о структуре и свойствах химических соединений и наноматериалов	Экзамен	1,2

### 7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
Экзамен	Аспирант предоставляет написанный реферат на	Отлично: Объем не менее 30 листов, тема раскрыта, цитируются новейшие

	предложенную тему по цифровым двойникам материалов и хранилищам цифровых моделей химических соединений, кристаллов, материалов и наноматериалов.	источники из периодических научных журналов списка Scopus, Web of Science, приводятся самостоятельно выполненные иллюстрации. Хорошо: Объем менее 30 листов, но не менее 20, , тема раскрыта, цитируются периодические научные журналы, приводятся заимствованные иллюстрации. Удовлетворительно: Объем не менее 10 листов, но меньше 20, цитируются периодические научные журналы 10-летней давности, иллюстрации не приводятся. Неудовлетворительно: Реферат отсутствует.
Текущий - проверка подготовленных файлов с расчетными данными	Аспирант предоставляет на проверку выходные файлы результатов моделирования и расчетов, выполненных самостоятельно.	Зачтено: Расчеты выполнены корректно Не зачтено: Расчеты выполнены с ошибками или не выполнены

### 7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
Экзамен	Темы рефератов: 1. Materials Cloud как инструмент хранения, депонирования, анализа, поиска расчетных данных о материалах 2. Crystallography Open Database как инструмент хранения, депонирования, анализа, поиска расчетных данных о материалах 3. Materials Project как инструмент хранения, депонирования, анализа, поиска расчетных данных о материалах 4. Open Quantum Materials Database как инструмент хранения, депонирования, анализа, поиска расчетных данных о материалах databases.pptx
Текущий - проверка подготовленных файлов с расчетными данными	Подготовьте выходные файлы для хранения информации о структуре и свойствах наноразмерных многокомпонентных систем: Задание 1 Модель и траектории эпоксидной смолы ЭД-20, отвержденной триэтилентетрамином Задание 2 Модель взаимодействия белков EP300 с субстратами на основе хиназолин-1,3,5-триазинов

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### Печатная учебно-методическая документация

#### а) основная литература:

1. Базы данных. Интеллектуальная обработка информации [Текст] В. В. Корнеев и др.; Рос. ассоц. изд. компьютер. лит. - М.: Нолидж, 2000. - 351 с. ил.

2. Агальцов, В. П. Базы данных [Текст] Кн. 2 Распределенные и удаленные базы данных учебник для вузов по направлению 230100 "Информатика и вычисл. техника" В. П. Агальцов. - М.: Форум : ИНФРА-М, 2009. - 270 с.
3. Голицына, О. Л. Базы данных [Текст] учеб. пособие для вузов по направлению 230700 "Прикл. информатика" О. Л. Голицына, Н. В. Максимов, И. И. Попов. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Форум, 2012. - 399 с. ил.
4. Катаргин, М. Ю. Базы данных [Текст] метод. указания по выполнению курсовых работ для направлений 01.03.02 "Приклад. математика и информатика" и 01.03.04 "Приклад. математика" (бакалавриат) М. Ю. Катаргин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Приклад. математика и программирование ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2019. - 45, [2] с. электрон. версия

*б) дополнительная литература:*

1. Multiscale modeling in solid mechanics : computational approaches Текст V. G. Kouznetsova et al.; eds. U. Galvanetto, M. H. F. Aliabadi. - London: Imperial College Press, 2010
2. Юшина, И. Д. Физико-химические свойства и структурные особенности халькогеназоло(азино)хинолиниевых полийодидов Текст дис. ... канд. хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия И. Д. Юшина ; науч. рук. Е. В. Барташевич ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск, 2016. - 183 с. ил.

*в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:*

1. ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК. СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

*г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:*

1. ГОСТ Р 51725.6-2002 : Каталогизация продукции для федеральных государственных нужд. Сети телекоммуникационные и базы данных. Требования информационной безопасности : введ. в действие 01.01.03 [Текст] Гос. учреждение "Федеральный центр каталогизации" и др. - М.: Госстандарт России, 2002. - 5 с.

*из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:*

1. ГОСТ Р 51725.6-2002 : Каталогизация продукции для федеральных государственных нужд. Сети телекоммуникационные и базы данных. Требования информационной безопасности : введ. в действие 01.01.03 [Текст] Гос. учреждение "Федеральный центр каталогизации" и др. - М.: Госстандарт России, 2002. - 5 с.

**Электронная учебно-методическая документация**

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная	Елисеев, А. А. Функциональные наноматериалы : учебное пособие / А. А. Елисеев, А. В. Лукашин ; под

		система издательства Лань	редакцией Б. Д. Третьякова. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 456 с. — ISBN 978-5-9221-1120-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/59578">https://e.lanbook.com/book/59578</a> (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Алексенко, А. Г. Графен : учебное пособие / А. Г. Алексенко. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 179 с. — ISBN 978-5-93208-509-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/166728">https://e.lanbook.com/book/166728</a> (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
3	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Сергеев, А. Г. Нанометрология : монография / А. Г. Сергеев. — Москва : Логос, 2020. — 416 с. — ISBN 978-5-98704-494-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/163080">https://e.lanbook.com/book/163080</a> (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Учебно-методические материалы кафедры	Materials Project <a href="https://materialsproject.org/">https://materialsproject.org/</a> <a href="http://www.amsmod.susu.ru/">http://www.amsmod.susu.ru/</a>
5	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Учебно-методические материалы кафедры	NOMAD <a href="https://www.nomad-coe.eu/">https://www.nomad-coe.eu/</a> <a href="http://www.amsmod.susu.ru/">http://www.amsmod.susu.ru/</a>

## 9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -Firefly(бессрочно)
2. -Python(бессрочно)
3. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)
4. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)
2. EBSCO Information Services-EBSCOhost Research Databases(28.02.2017)

## 10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	407 (1а)	Рабочая станция - компьютеры