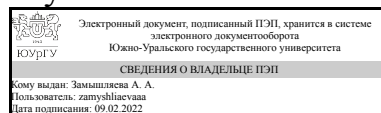


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



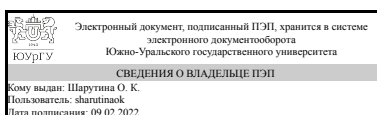
А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.07.01 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

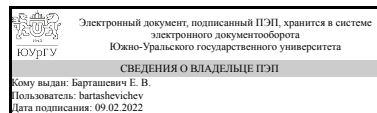
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 22.06.01 Технологии материалов, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 888

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.06.01 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.06.01 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: https://e.lanbook.com/book/59578 (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: https://e.lanbook.com/book/166728 (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: https://e.lanbook.com/book/163080 (дата обращения: 06.02.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
4	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Учебно-методические материалы кафедры	Materials Project https://materialsproject.org/ http://www.amsmod.susu.ru/
5	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Учебно-методические материалы кафедры	NOMAD https://www.nomad-coe.eu/ http://www.amsmod.susu.ru/

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(бессрочно)

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