

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1159009	Физическое моделирование квантовых систем

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Математическая физика и математическое моделирование	Код ОП 1. 03.04.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Физическое моделирование квантовых систем

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает две дисциплины «Нейро-квантовые технологии моделирования» и «Моделирование молекулярных систем». Дисциплина "Нейро-квантовые технологии моделирования" является специальным курсом, служащим базой для формирования компетенций в области прикладных квантовых вычислений. В рамках данной дисциплины рассматривается общая проблематика применения искусственных нейронных сетей (ИНС) в области физического моделирования квантовых систем. Дается развернутое описание методов аналитической работы с квантовыми степенями свободы систем (формализм Гильбертова пространства, принцип его полноты, квантовые гамильтонианы электронных и спиновых моделей). Основная парадигма курса строится на использовании технологии ИНС для решения квантовых гамильтонианов, в рамках которой ИНС применяется для эффективного обращения к элементам Гильбертова пространства. Дисциплина «Моделирование молекулярных систем» направлена на изучение моделей межатомных взаимодействий в твердых телах с различным типом химической связи. Анализируются как простейшие виды межатомных потенциалов, например, потенциал Леннарда-Джонса так и более сложные виды потенциалов с большим числом параметров. Рассматриваются два подхода к построению потенциалов: эмпирический и неэмпирический (из первых принципов), а также вопросы построения универсальных межатомных потенциалов при помощи технологий машинного обучения. Рассматриваются базовые подходы классической и первопринципной молекулярной динамики для описания свойств изучаемых систем.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Нейро-квантовые технологии моделирования	3
2	Моделирование молекулярных систем	3
ИТОГО по модулю:		6

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Моделирование молекулярных систем	УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде	<p>З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций</p> <p>У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p>
	УК-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	<p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</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>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>Д-2 - Демонстрировать способность убеждать, аргументировать свою позицию</p>
	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>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</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>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>У-2 - Применять методы и средства разработки программного обеспечения, баз данных, программных интерфейсов</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>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>У-1 - Выбирать методы и средства проведения исследований и разработок с учетом специфики поставленной задачи</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p>
<p>Нейро-квантовые технологии моделирования</p>	<p>УК-4 - Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия</p>	<p>З-2 - Излагать нормы и правила составления устных и письменных текстов для научного и официально-делового общения на родном и иностранном (-ых) языках</p> <p>У-3 - Выбирать инструменты современных коммуникативных технологий для эффективного осуществления академического и профессионального взаимодействия</p>

	<p>П-2 - Осуществлять поиск вариантов использования инструментов современных коммуникативных технологий для решения проблемных ситуаций академического и профессионального взаимодействия</p> <p>Д-1 - Проявлять доброжелательность и толерантность по отношению к коммуникативным партнерам</p>
<p>УК-7 - Способен обрабатывать, анализировать, передавать данные и информацию с использованием цифровых средств для эффективного решения поставленных задач с учетом требований информационной безопасности</p>	<p>З-2 - Описать способы и средства защиты персональных данных и данных в организации в соответствии с действующим законодательством</p> <p>У-2 - Выбирать современные цифровые средства и технологии для обработки, анализа и передачи данных с учетом поставленных задач</p> <p>П-2 - Решать поставленные задачи, используя эффективные цифровые средства и средства информационной безопасности</p>
<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p>
<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и</p>

<p>обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p>
<p>ПК-1 - Способен самостоятельно осваивать и применять современные математические методы исследования, анализа и обработки данных, компьютерные программы, средства разработки, научно-исследовательскую, измерительно-аналитическую и технологическую аппаратуру (в соответствии с избранным направлением прикладных математики и физики)</p>	<p>З-1 - Сделать обзор существующих методов и подходов к решению научных проблем в области проводимых исследований</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в области проводимых исследований</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>
<p>ПК-2 - Способен осуществлять эффективное управление разработкой программных средств и проектов</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание архитектуры и принципов построения программного обеспечения и виды архитектуры программного обеспечения</p> <p>У-1 - Использовать типовые решения и шаблоны разработки 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>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Нейро-квантовые технологии
моделирования

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Кашин Илья Владимирович	кандидат физико- математических наук, без ученого звания	Доцент	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 6 от 11.02.2022 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Кашин Илья Владимирович, Доцент, теоретической физики и прикладной математики**

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Введение	Данные и наука о них. Искусственные нейронные сети (ИНС). Значимость их изучения и применения сегодня.
P2	Математика и отношение математики к физике	Введение в общую методологию и теорию систем. Математические модели и принцип их применения. Методологическое соотношение бесконечно малой величины и конечного приращения. Аддитивность и неаддитивность системы. Методологическое сходство математики и квантовой механики.
P3	Основные сведения о квантовой механике	Соотношение волновой и корпускулярной модели вещества и излучения. Интерпретация неопределенности Гейзенберга на уровне неаддитивности материи и пространства. Критерий полноты. Физическая интерпретация аппарата операторной алгебры.
P4	Элементы квантовой теории твёрдого тела	Методологическая основа физического приближения. Соотношение понятий "взаимодействие" и "скоррелированность". Адиабатическое приближение. Эффективное электронное взаимодействие. Детерминант Слэтера. Эффективное среднее поле и самосогласованность теоретического подхода к описанию квантового твёрдого тела. Учёт кристаллической структуры. Теорема Блоха. Прямое и обратное пространства. Решётка Браве и зоны Бриллюэна. Квазиимпульс электронов в кристалле.

P5	Модельные подходы к квантовому описанию твёрдого тела	Модель Хаббарда. Внутриаомное кулоновское и обменное взаимодействие. Базис чисел заполнения. Учёт фермионной симметрии. Модель Гейзенберга. Изотропное и анизотропное межатомное обменное взаимодействие. Базис "чистых" спиновых состояний.
P6	Базовые сведения об ИНС	Биологические предпосылки построения моделей ИНС. Модельный образ нейронов и синапсов. Принцип "обучения" ИНС. Нейрон смещения. Матричный аппарат для расчёта отклика ИНС. Введение в математические основы искусственного интеллекта (ИИ).
P7	Общие сведения об "обучении" ИНС	Математическая репрезентация "обучения" ИНС в качестве задачи оптимизации. Метод золотого сечения. Методы на основе градиента оптимизируемой функции (градиентный спуск и сопряжённые градиенты).
P8	Алгоритма оптимизации без участия градиента функции	Метод Монте-Карло. Генетический алгоритм оптимизации.
P9	Специализированные алгоритмы "обучения" ИНС	Метод обратного распространения ошибки для ИНС прямого распространения. Ограниченная машина Больцмана. Стохастический нейрон. Принцип "обучения" ограниченной машины Больцмана.
P10	Постановка квантовой физической задачи для ИНС	Полная диагонализация матрицы гамильтониана и фундаментальное ограничение такого подхода. Частичная диагонализация методом Ланцоша. Вариационный принцип квантовой механики. Методы оценки энергии квантового состояния (прямой стохастический метод, метод вариационного Монте-Карло).
P11	Принцип применения ИНС в квантовых задачах	Представление Гильбертова пространства в формализме ИНС. Обучение ИНС как оптимизация функции энергии физической системы.
P12	Научные достижения в области применения ИНС для квантовых задач	Специфика применения ограниченной машины Больцмана для расчёта модели Гейзенберга. Специфика применения ИНС прямого распространения для расчёта модели Бозе-Хаббарда. Методы AdaGrad и Adam для оптимизации функции энергии.
P13	Перспективы, выводы и заключение	Перспективы, выводы и заключение

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Нейро-квантовые технологии моделирования

Электронные ресурсы (издания)

1. Барский, А. Б.; Введение в нейронные сети : практическое пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Москва; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=233688> (Электронное издание)
2. Шень, А. Х.; Классические и квантовые вычисления: курс : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Москва; 2007; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=234673> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Медведев, В. С., Потемкин, В. Г.; Нейронные сети. Matlab 6; ДИАЛОГ-МИФИ, Москва; 2002 (2 экз.)
2. Головкин, В. А., Галушкин, А. И.; Нейронные сети: обучение, организация и применение : Учеб. пособие для студентов по направлению подгот. бакалавров и магистров "Прикладная математика и физика".; ИПРЖР, Москва; 2001 (2 экз.)
3. Хайкин, С.; Нейронные сети : полный курс.; Вильямс, Москва [и др.]; 2006 (4 экз.)
4. Кайе, Кайе Ф., Лафлам, Лафлам Р., Моска, Моска М., Никитина, Т. С., Анохин, А. В.; Введение в квантовые вычисления; Институт компьютерных исследований : Регулярная и хаотичная динамика, Москва ; Ижевск; 2009 (2 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Edmund C. Stoner. "Collective Electron Ferromagnetism". In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 165.922 (1938), с. 372-414. ISSN: 00804630. URL: <http://www.jstor.org/stable/97057>.
2. C. Lanczos. "An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators". In: J. Res. Nat'l Bur. Std. 45 (1950), с. 255-282. URL: <http://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/045/>
3. J. Hubbard. "Electron Correlations in Narrow Energy Bands". In: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 276.1365 (1963), с. 238. DOI: 10.1098/rspa.1963.0204. URL: <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/276/1365/238>.
4. Geoffrey E. Hinton. "Training Products of Experts by Minimizing Contrastive Divergence". In: Neural Computation 14.8 (2002), с. 1771-1800. DOI: 10.1162/089976602760128018. URL: <https://doi.org/10.1162/089976602760128018>.
5. John Duchi, Elad Hazan and Yoram Singer. "Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization". In: Journal of Machine Learning Research 12.61 (2011), с. 2121-2159. URL: <http://jmlr.org/papers/v12/duchi11a.html>.
6. Niklas Romming et al., "Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions". In: Science 341.6146 (2013), с. 636-639. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.1240573. eprint: <https://science.sciencemag.org/content/341/6146/636.full.pdf>. URL: <https://science.sciencemag.org/content/341/6146/636>.

7. Lorenzo Cevolani, Giuseppe Carleo and Laurent Sanchez-Palencia. “Protected quasilocality in quantum systems with long-range interactions”. In: Phys. Rev. A 92 (2015), 041603. DOI: 10.1103/PhysRevA.92.041603. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.041603>.
8. Kota Ido, Takahiro Ohgoe and Masatoshi Imada. “Time-dependent manyvariable variational Monte Carlo method for nonequilibrium strongly correlated electron systems”. In: Phys. Rev. B 92 (2015), 245106. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.245106. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.245106>.
9. B. Blaß and H. Rieger. “Test of quantum thermalization in the two-dimensional transverse-field Ising model”. In: Sci. Rep. 6 (2016), 38185. URL: <https://doi.org/10.1038/srep38185>.
10. Giuseppe Carleo and Matthias Troyer. “Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks”. In: Science 355 (2017), c. 602-606. DOI: 10.1126/science.aag2302. URL: <https://science.sciencemag.org/content/355/6325/602>.
11. Diederik P. Kingma and Jimmy Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization (2017). arXiv: 1412.6980
12. Darya Medvedeva et al., “Exact diagonalization solver for extended dynamical mean-field theory”. In: Phys. Rev. B 96 (2017), 235149. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.235149. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.235149>.
13. Thibaut Perol, Michael Gharbi and Marine Denolle. “Convolutional neural network for earthquake detection and location”. In: Science Advances 4.2 (2018). DOI: 10.1126/sciadv.1700578. EPRINT: <https://advances.sciencemag.org/content/4/2/e1700578.full.pdf>. URL: <https://advances.sciencemag.org/content/4/2/e1700578>.
14. Hiroki Saito and Masaya Kato. “Machine Learning Technique to Find Quantum Many-Body Ground States of Bosons on a Lattice”. In: J. Phys. Soc. Jpn. 87.1 (2018), 014001. DOI: 10.7566/JPSJ.87.014001. URL: <https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.014001>.
15. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov and V. V. Mazurenko. “Profile approach for recognition of three-dimensional magnetic structures”. In: Phys. Rev. B 99 (2019), 024430. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.024430. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.024430>.
16. Oleg M Sotnikov and Vladimir V Mazurenko. “Neural network agent playing spin Hamiltonian games on a quantum computer”. In: Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 53.13 (2020), 135303. DOI: 10.1088/1751-8121/ab73ad. URL: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab73ad>.
17. Supplementary Materials of Science 355, 602-606 (2017).
18. Павел Нестеров. Ограниченная машина Больцмана как основа глубоких нейронных се-тей. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=eSPgqo4XzrI>.
19. Павел Нестеров. Онлайн-лекция по ограниченной машине Больцмана. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=sYtHNyxw-W4>.
20. Самые популярные топологии искусственных нейронных сетей. URL: <https://www.asimovinstitute.org/the-neural-network-zoo-2016/>.

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

www.iop.org

www.nature.com

archive.neicon.ru

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Нейро-квантовые технологии моделирования

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Mathematica 11 Network Increment Standard 15-Users Bundled List Price with Service Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лабораторные занятия	Рабочее место преподавателя Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Моделирование молекулярных систем

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 6 от 11.02.2022 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Модели описания межатомных взаимодействий	Модель парных потенциалов. Потенциал Леннарда-Джонса. Недостатки парных потенциалов. Многочастичные потенциалы для металлов (EAM). Многочастичные потенциалы для полупроводников. Универсальный метод (MEAM). Дальнодействующие силы.
P2	Использование межатомных потенциалов. Классический метод МД.	Классические уравнения движения и методы интегрирования. Алгоритм Верле. Метод «предсказаний и поправок». Метод средней точки. Прыжковый метод. Метод Эйлера-Ричардсона. Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин
P3	Молекулярная динамика из первых принципов	Молекулярная динамика Эренфеста. Молекулярная динамика Борна-Оппенгеймера. Молекулярная динамика Кара-Паринелло. Проблема выбора метода. Силы в «первопринципных» молекулярно-динамических расчетах. Теория функционала электронной плотности. Простые термодинамические средние. Структурные свойства. Временные корреляционные функции и коэффициенты переноса.
P4	Приложения метода МД к реальным системам	Моделирование наносистем с использованием пакета ESPRESSO. Моделирование наноматериалов. Исследование структуры и динамики воды.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Моделирование молекулярных систем

Электронные ресурсы (издания)

1. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
2. Кручинин, Н. Ю.; Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах : учебное пособие.; Оренбургский государственный университет, Оренбург; 2016; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=439224> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Полухин, В. А., Лепинских, Б. М.; Моделирование аморфных металлов; Наука, Москва; 1985 (2 экз.)
2. Карькина, Л. Е.; Моделирование атомной структуры дефектов в кристаллах; УрО РАН, Екатеринбург; 2011 (6 экз.)
3. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (4 экз.)
4. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (6 экз.)
5. Кручинин, Н. Ю.; Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах : учебное пособие.; Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, Оренбург; 2015; <http://www.iprbookshop.ru/54125.html> (Электронное издание)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

www.nature.com

archive.neicon.ru

www.iop.org

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

www.scopus.com

materials.springer.com

archive.neicon.ru

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Моделирование молекулярных систем

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Mathematica 11 Network Increment Standard 15-Users Bundled List Price with Service Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лабораторные занятия	Рабочее место преподавателя Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM