

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
1161523	Квантовые вычисления

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Прикладные математика и физика	Код ОП 1. 03.03.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.03.01

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 **Квантовые вычисления**

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль содержит три дисциплины – «Квантовое машинное обучение», «Квантовые компьютеры и квантовые вычисления» и «Численные методы материаловедения». В дисциплине "Квантовое машинное обучение" подробно рассматриваются математические основы технологий машинного обучения (формализм искусственных нейронных сетей, а также методы их "обучения": общие, т.е. сводящиеся к задаче на оптимизацию, и частные, например, метод обратного распространения ошибки). В данном научном контексте ключевая новая компетенция, на формирование которой нацелена дисциплина - это навыки применения технологий машинного обучения для численного решения спиновых и электронных квантовых Гамильтонианов, для которых стандартные подходы оказываются неприменимыми в силу ограниченности вычислительных ресурсов. Целью курса «Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы» является обучение способности формулировать задачи для их решения на квантовых вычислительных устройствах. В рамках курса рассматривается предыстория возникновения квантовых вычислений, а также основные понятия теории такие, как кубит, сфера Блоха, квантовые логические элементы, квантовые схемы, принцип суперпозиции, запутанность. Разбираются известные квантовые алгоритмы и процедуры коррекции ошибок. Особое внимание уделяется методам моделирования физических процессов на квантовых компьютерах. В отдельной части курса изучается физическая реализация квантовых вычислительных устройств, моделей квантовых симуляторов и шума. Курс «Численные методы материаловедения» предназначен для студентов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния вещества, физики магнитных явлений и материаловедения. В данном курсе рассматривается численное решение типовых задач квантовой физики твердого тела (движение электронов в потенциальной яме и периодическом потенциале, расчет зон Бриллюэна, туннелирование через потенциальный барьер, моделирование доменной границы и ее движения), статистической физики твердого тела (моделирование ферро- и антиферромагнетика в 2-мерной модели Изинга методом Метрополиса, моделирование колебаний кристаллической решетки и нахождение фононного спектра). Так же, студенты кратко знакомятся с современным программным обеспечением, применимым для решения подобного рода задач (Mathematica, Matlab и Simulink, COMSOL Multiphysics). Цель курса – рассмотрение примеров решения типовых задач физики твердого тела и обзор современных программных продуктов, их применимости и стоимости. Рассматриваются также квантовые алгоритмы для решения задач физики твердого тела и материаловедения.

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	Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы	4
2	Численные методы материаловедения	5
3	Квантовое машинное обучение	3
ИТОГО по модулю:		12

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Машинное обучение

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
Квантовое машинное обучение	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	<p>З-1 - Сравнивать возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации</p> <p>У-1 - Осуществлять выбор адекватного программного обеспечения при решении задач по профилю деятельности</p> <p>П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
	ПК-1 - Способен планировать и проводить научные эксперименты в области физики конденсированного состояния и (или) теоретические (аналитические и компьютерные) исследования	<p>З-1 - Изложить цели и задачи производимых исследований</p> <p>У-1 - Анализировать причины возникающих погрешностей в расчетных и экспериментальных данных</p> <p>П-1 - Иметь практический опыт применения различных методов физических исследований в избранной предметной области: экспериментальных методов, статистических методов обработки экспериментальных данных, методов теоретической физики, вычислительных методов, современных методов математического и компьютерного моделирования объектов и процессов</p>

<p>Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы</p>	<p>ОПК-3 - Способен систематизировать, анализировать и обобщать результаты научных исследований на основе информационной и библиографической культуры</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов анализа и обобщения результатов научных исследований</p> <p>З-2 - Формулировать требования к оформлению результатов исследований</p> <p>З-3 - Демонстрировать понимание приемов и способов самостоятельного поиска и осмысления информации в соответствии с профессиональными задачами</p> <p>У-1 - Систематизировать и анализировать результаты экспериментов, наблюдений, измерений</p> <p>У-2 - Оформлять результаты исследовательской деятельности в виде обзоров литературы, справок, методик в соответствии с принятыми в профессиональной области требованиями</p> <p>У-3 - Интерпретировать результаты собственных исследований, соотнося их с данными научной литературы, формулировать заключения и выводы по результатам исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт представления обобщенных результатов исследовательской деятельности и их оформления в виде текстовых, графических и иных материалов в соответствии с требованиями</p> <p>П-2 - Иметь опыт написания обзоров литературы, справок, методик экспериментов, описания и обсуждения результатов экспериментов на основе информационной и библиографической культуры</p> <p>П-3 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов по лабораторным работам, практикам, научным исследованиям на основе информационной и библиографической культуры</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие когнитивных умений</p>
	<p>ОПК-4 - Способен решать задачи профессиональной деятельности с</p>	<p>З-1 - Формулировать представления о роли современных информационно-коммуникационных технологий для</p>

	использованием информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности	<p>решения задач профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Обосновывать выбор современных ИТ-технологий для сбора, анализа, обработки и представления информации по профилю деятельности</p> <p>П-1 - Предлагать способы сбора, анализа и обработки информации по профилю деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
Численные методы материаловедения	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	<p>З-1 - Сравнивать возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации</p> <p>У-2 - Осуществлять поиск и выбор необходимых информационных баз данных для решения профессиональных задач</p> <p>П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных</p>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Квантовые компьютеры и квантовые
алгоритмы

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 № 5 от 12.01.2024 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	Вычислительные ресурсы и пределы вычислительной мощности	Архитектура классических компьютеров, устройство памяти, принципы вычислительных операций. Закон Мура. Машина Тьюринга. Стандартные классы сложности вычислений. Физический тезис Чёрча-Тьюринга и его обобщение. Обратимые и необратимые цепи логических элементов. Диссипация энергии в необратимых цепях: принцип Ландауэра, демон Максвелла. Обратимые элементы и квантовые вычисления. Управляющие линии, контролируемые логические элементы: CNOT, элемент Тоффоли, элемент Фредкина. Физические ограничения классических компьютеров: неизбежность перехода к квантовым вычислениям.
P2	Теория квантовых вычислений и квантовой информации	Представление информации в квантовых компьютерах: аналог классического бита (кубит). Принцип суперпозиции состояний. Математическая запись состояния кубита. Глобальная и квантовая фазы. Графическое представление состояния кубита: двумерное представление, сфера Блоха, Q-сфера. Квантовые логические элементы как унитарные операторы. Универсальные квантовые операторы. Однокубитные, многокубитные и контролируемые квантовые операторы. Стандартный набор квантовых операций. Вычислительный базис и измерение, отношение с квантовым вектором состояния и матрицей плотности. Размер базиса и вид квантовых операторов. Прямое и тензорное матричные

		произведения. Запутан-ные состояния, логический элемент Белла. Чистые и смешанные состояния. Частичное измерение: уменьшение размерности матрицы плотности состояния с уменьшением размера вычислительного базиса. Информационная энтропия (энтропия фон Неймана), взаимная энтропия. Понятие квантовой цепи, рас-пространённые цепи: сверхплотное кодирование, телепортация кубита. Ограничения, связанные с архитектурой квантового компьютера. Запутанность как физический ресурс, квантовая память
P3	Языки программирования для квантовых вычислений	Облачные сервисы для квантовых вычислений: IBMQ и Quantum Composer. Квантовый ассемблер. Высокоуровневые языки и библиотеки для языка py-thon. Qiskit Terra. Программирование квантовых цепей. Симуляторы квантовых вычислений. Выполнение расчётов на реальном квантовом компьютере и симуляторах.
P4	Квантовые алгоритмы общего назначения	Квантовые цепи и классическое программирование. Квантовый параллелизм: алгоритм Дойча и его обобщение на случай нескольких кубитов (алгоритм Дойча-Йожи). Квантовое преобразование Фурье, алгоритм Шора. Сложность классических алгоритмов поиска. Квантовый поиск: алгоритм Гровера. Задачи, демонстрирующие квантовое превосходство.
P5	Моделирование физических процессов на квантовых компьютерах	Представление спиновых и электронных моделей на квантовом компьютере. Инициализация квантового состояния. Вычисление наблюдаемых. Вариационный принцип. Эволюционный подход Троттера. Методы машинного обучения: обучение с подкреплением.
P6	Квантовые ошибки и шум	Точность квантовых вычислений. Причины возникновения ошибок: классический шум, нежелательное межкубитное взаимодействие, декогеренция квантового состояния, погрешность измерения. Процедуры коррекции квантовых ошибок. Вспомогательные ку-биты. Классические модели квантовых вычислений: симулятор квантового компьютера. Сравнение сильных и слабых сторон различных видов симуляторов. Классическое моделирование квантовых ошибок.
P7	Физическая реализация кубит и их взаимодействия	Физические условия для реализации кубит их взаимодействия. Спиновые кубиты. Сверхпроводящие кубиты. Модели физической реализации квантового компьютера: ионы в ловушке, кубиты на основе ядерного магнитного резонанса, полупроводниковый зарядовый кубит, квантовые точки. Инициализация начального состояния кубит. Реализация унитарных преобразований, процедуры измерения, фазового и амплитудного вращений, двухкубитных операций.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной	Вид воспитательной	Технология воспитательной	Компетенция	Результаты обучения
----------------------------	--------------------	---------------------------	-------------	---------------------

деятельности	деятельности	деятельности		
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-3 - Способен систематизировать, анализировать и обобщать результаты научных исследований на основе информационной и библиографической культуры	Д-1 - Демонстрировать развитие когнитивных умений

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы

Электронные ресурсы (издания)

1. 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. Китаев, А.; Классические и квантовые вычисления; МЦНМО: ЧеРо, Москва; 1999 (1 экз.)
2. Стин, Стин Э., Пасынков, И. Д.; Квантовые вычисления; Регулярная и хаотическая динамика, Москва; Ижевск; 2000 (3 экз.)
3. Стин, Э., Пасынков, И. Д.; Квантовые вычисления; РХД, Москва; 2000 (5 экз.)
4. Прескилл, Прескилл Д., Нечаева, Т. С., Епифанов, С. С., Новокшонов, С. Г.; Квантовая информация и квантовые вычисления : [в 2 т.]. Т. 1. ; Регулярная и хаотическая динамика : Институт Компьютерных Исследований, Москва ; Ижевск; 2008 (1 экз.)
5. Прескилл, Дж., Нечаева, Т. С., Епифанов, С. С., Новокшонов, С. Г.; Т. 1; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2008 (1 экз.)
6. 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.)
7. Кайе, Ф., Никитина, Т. С., Анохин, А. В.; Введение в квантовые вычисления; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2009 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

Режим доступа: <http://www.rsl.ru>

3. Публичная электронная библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

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

Электронные образовательные ресурсы

<http://ststudy.urfu.ru/view>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовые компьютеры и квантовые алгоритмы

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	Cisco IP Base to Ent. Services license for 16 Port Catalyst 4500-X (L-C4500X-16P-IP-ES)
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Cisco C3750X-24 LAN Base to IP Base E-License (L-C3750X-24-L-S)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Численные методы материаловедения

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Андреев Сергей Николаевич	без ученой степени, без ученого звания	Преподаватель	теоретической физики и прикладной математики
2	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико-математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 5 от 12.01.2024 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Андреев Сергей Николаевич, Преподаватель, теоретической физики и прикладной математики
- Мазуренко Владимир Владимирович, Заведующий кафедрой, 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	Основы квантовой механики.	Волновые функции и пространство Гильберта. Смешанные состояния и матрица плотности. Принцип неопределенности. Уравнение Шредингера. Квантовая частица в свободном пространстве. Одночастичная квантовая задача. Метод Нумерова. Одномерная задача рассеивания. Связанные состояния и задача на собственные значения. Численное решение трехмерного уравнения Шредингера.
P2	Геометрия кристаллической решётки. Основы кристаллографии	Элементы симметрии кристаллов. Понятие кристалла, симметрии кристалла. Номенклатура преобразований симметрии: обозначения Шёнфлиса и международные, их изображение. Решетки кристаллов. Трансляционные группы. Трансляционные группы кристалла, понятие сингонии. Решетка Бравэ, типы и описание решеток Бравэ. Элементарная ячейка, примитивная ячейка, ячейка Бравэ.

		<p>Пространственные группы кристаллов. Открытые элементы симметрии, их обозначения. Принципы написания символов пространственных групп.</p> <p>Обратная решетка и зоны Бриллюэна. Определение обратной решетки, построение обратных решеток для ГЦК, ОЦК. Определение зоны Бриллюэна.</p> <p>Структурная релаксация.</p>
P3	Метод Хартри-Фока	<p>Электронная структура молекул и атомов твердых тел. Задача электронной структуры. Базисные функции. Электронный газ. Орбитали Слэтера. Орбитали Гаусса. Метод Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока. Уравнение Хартри-Фока в неортогональном базисе</p>
P4	Теория функционала плотности	<p>Функционал электронной плотности. Основные положения ФЭП. Теоремы Хоэнберга — Кона. Вариационный принцип. Уравнение Кона-Шэма. Сравнение с методом Хартри-Фока.</p> <p>Приближение локальной электронной плотности. LDA, LSDA. Преимущества и недостатки локальной электронной плотности.</p> <p>Методы более точного описания обменнокорреляционного потенциала. GGA. SIC-LDA (self- interaction correction) Метод GW. Приближение LDA+U. Основа LDA+U. Расщепление одноэлектронных состояний. Полная энергия как функция полного числа частиц. Энергия обменного взаимодействия. Функционал приближения LDA+U.</p> <p>Методы расчета зонной структуры: Энергетические зоны электронов. Блоховские функции.</p> <p>Плотность состояний и интегрирование в обратном пространстве методом тетраэдров.</p> <p>Приближение сильной связи. Гамильтониан. Функции Ванье. Интегралы перекрытия. МТ-потенциал. Метод присоединенных плоских волн. Метод ортогонализированных плоских волн. Метод Корринги-Кона-Ростокера. Метод псевдопотенциала.</p>
P5	Теория динамического среднего поля	<p>Определение коррелированных и некоррелированных электронов. Гамильтониан кристалла с некоррелированными электронами в приближении сильной связи, в прямом и обратном пространстве. Функция Грина такого кристалла и ее связь с спектром плотности электронных состояний. Энергетическое представление электронных корреляций - собственная энергетическая часть (СЭЧ). Приближение локальная собственной энергетической части (считаем, что СЭЧ не зависит от K, а зависит только от ω - ЛСЭЧ) Связь функций Грина кристалла с коррелированными и некоррелированными электронами через уравнение Дайсона.</p> <p>Главная идея метода среднего поля. Модель Хаббарда и модель Андресона. Метод динамического среднего поля как</p>

		метод расчета ЛСЭЧ. Эффективная примесь и эффективная среда, эффективная модель Андерсона. Формула для расчета функции Грина эффективной примеси с некоррелированными электронами. Численные методы расчета функции Грина эффективной примеси с коррелированными электронами. Расчет ЛСЭЧ с помощью уравнения Дайсона (через принцип тождественности ЛСЭЧ узла кристалла и приме-си). Расчет функции Грина эффективной среды исходя из ЛСЭЧ и функции Грина кристалла с коррелированными электронами. Численные методы определения новых параметров эффективной примеси.
Р6	Методы расчетов систем содержащих примеси	Метод суперячеек. Метод виртуального кристалла. Метод когерентного потенциала.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	У-2 - Осуществлять поиск и выбор необходимых информационных баз данных для решения профессиональных задач П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Численные методы материаловедения

Электронные ресурсы (издания)

1. Ландау, Л. Д.; Кватовая механика : монография. 1. ; Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва, Ленинград; 1948;

<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=474072> (Электронное издание)

2. Ландау, Л. Д.; Кватовая механика : монография. 1. ; Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва, Ленинград; 1948;
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=474072> (Электронное издание)

3. , Ржевская, С. В.; Материаловедение: практикум : учебное пособие.; Логос, Москва; 2006;
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=89915> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 1. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (86 экз.)

2. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 2. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)

3. , Позднеев, Д. Б.; Машинное моделирование при исследовании материалов. Моделирование на ЭВМ дефектов кристалл. решетки : Сб. пер.; Мир, Москва; 1974 (2 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

Режим доступа: <http://www.rsl.ru>

3. Публичная электронная библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

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

Электронные образовательные ресурсы

<http://study.urfu.ru/view>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Численные методы материаловедения

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность 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 Подключение к сети Интернет	Cisco C3750X-24 LAN Base to IP Base E-License (L-C3750X-24-L-S)
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Cisco C3750X-24 LAN Base to IP Base E-License (L-C3750X-24-L-S)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Квантовое машинное обучение

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
2	Яковлев Илья Александрович	без ученой степени, без ученого звания	Преподаватель	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 5 от 12.01.2024 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики
- Яковлев Илья Александрович, Преподаватель, 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. Машинное обучение и нейронные сети. 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.

		<p>Учёт кристаллической структуры. Теорема Блоха. Прямое и обратное пространства. Решётка Браве и зоны Бриллюэна. Квазиимпульс электронов в кристалле.</p> <p>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.</p>
P5	Модельные подходы к квантовому описанию твёрдого тела.	Модель Хаббарда. Внутриатомное 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 нейросетях.	<p>Биологические предпосылки построения моделей нейронных сетей. Модельный образ нейронов и синапсов. Принцип "обучения". Нейрон смещения. Матричный аппарат для расчёта отклика нейронных сетей.</p> <p>Введение в математические основы искусственного интеллекта.</p>
P7	Общие сведения об "обучении" нейросетей.	Математическая репрезентация "обучения" нейросети 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" нейросети.	Метод обратного распространения ошибки для нейросетей прямого распространения. Ограниченная машина Больцмана. Стохастический нейрон. Принцип "обучения" ограниченной машины Больцмана.
P10	Постановка квантовой физической задачи для нейросети.	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 нейронных сетей в квантовых задачах.	Представление Гильбертова пространства в формализме нейронных сетей. Обучение нейросети как оптимизация функции энергии физической системы.
P12	Научные результаты в области применения	Специфика применения ограниченной машины Больцмана для расчёта модели Гейзенберга. Специфика применения

	машинного обучения для квантовых задач.	нейросетей прямого распространения для расчёта свойств модели Бозе-Хаббарда. Методы AdaGrad и Adam для оптимизации функции энергии.
P13	Квантовая томография.	Основные принципы реконструкции квантового состояния на классическом компьютере. Проблема выбора набора базисов и наблюдаемых для измерений. Фундаментальные ограничения квантовой томографии. Использование нейроквантовых состояний в томографии. Метод классической тени для характеристики квантовых состояний.
P14	Низкоразмерная визуализация и кластеризация квантовых состояний.	Методы классификации и сертификации волновых функций. Фазовые переходы в квантовых системах.
P15	Квантовое машинное обучение	Квантовая формулировка базовых подходов машинного обучения: метод главных компонент, метод опорных векторов и др. Квантовые автокодировщики. Обучение и применение.
P16	Перспективы, выводы и заключение.	

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности Технология самостоятельной работы	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовое машинное обучение

Электронные ресурсы (издания)

1. Барский, А. Б.; Логические нейронные сети : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ)|Бином. Лаборатория знаний, Москва; 2007; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232983> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 1. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (86 экз.)
2. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 2. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)
3. Яхьяева, Г. Э.; Нечеткие множества и нейронные сети : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий, Москва; [2012] (2 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

Режим доступа: <http://www.rsl.ru>

3. Публичная электронная библиотека

Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>

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

Электронные образовательные ресурсы

<http://stdy.urfu.ru/view>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовое машинное обучение

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	Рабочее место преподавателя Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Cisco IP Base to Ent. Services license for 16 Port Catalyst 4500-X (L-C4500X-16P-IP-ES)
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Cisco IP Base to Ent. Services license for 16 Port Catalyst 4500-X (L-C4500X-16P-IP-ES)