

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
1153279	Моделирование реальных процессов

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 Моделирование реальных процессов

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает две дисциплины – "Метод молекулярной динамики" и "Регулярная и хаотическая динамика". В дисциплине "Регулярная и хаотическая динамика" вводятся понятия устойчивости движения и структурной устойчивости динамических систем. Описаны методы вычисления показателей Ляпунова. Кратко изложены основные понятия и результаты теории катастроф. Рассматривается неустойчивая динамика в неинтегрируемых консервативных и диссипативных системах: гамильтонов хаос в модели Заславского-Чирикова, диссипативный хаос в непрерывной модели Лоренца, дискретных моделях Хенона и Икеды. Даны основы теории мультифрактальной структуры хаотических аттракторов, возникающих в динамике нелинейных диссипативных систем. В дисциплине «Метод молекулярной динамики» рассматриваются базовые принципы моделирования атомной структуры различных классов твердых тел. В рамках части, посвященной классической молекулярной динамике, анализируются как простейшие виды межатомных потенциалов, например, потенциал Леннарда-Джонса так и более сложные виды потенциалов с большим числом параметров. Особое внимание уделяется теоретическому и численному описанию систем с беспорядком. Полноценное освоение материала достигается за счет выполнения ряда лабораторных работ. Во второй части курса рассматриваются базовые подходы первопринципной молекулярной динамики, вопросы построения универсальных межатомных потенциалов при помощи технологий машинного обучения.

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	Метод молекулярной динамики	3
2	Регулярная и хаотическая динамика	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
Метод молекулярной динамики	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>
	УК-3 - Способен организовать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели	<p>З-3 - Характеризовать виды командных стратегий, факторы формирования успешной команды для эффективной деятельности</p> <p>У-3 - Анализировать виды командных стратегий для достижения целей работы команды</p> <p>П-2 - Обосновать выбор членов команды и распределения полномочий (функций) ее членов, координировать взаимодействия членов команды</p> <p>Д-2 - Демонстрировать умение эффективно работать в команде</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</p>

		исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники
ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности		<p>З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Выбирать и использовать современные ИТ-технологии и базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий и баз данных</p>
ПК-2 - Способен осуществлять эффективное управление разработкой программных средств и проектов		<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>
ПК-3 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок		<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>
Регулярная и хаотическая динамика	<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>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</p>

		<p>соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и 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>

		П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники
--	--	---

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Метод молекулярной динамики

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико- математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- 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	Основные задачи, решаемые методом МД	Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин
P2	Классический метод МД	Классические уравнения движения и методы интегрирования. Алгоритм Верле. Метод «предсказаний и поправок». Метод средней точки. Прыжковый метод. Метод Эйлера-Ричардсона
P3	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. Способы контроля внешних параметров при использовании метода МД.
P4	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.
P5	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

Таблица 1.2

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Метод молекулярной динамики

Электронные ресурсы (издания)

1. Кручинин, Н. Ю.; Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах : учебное пособие.; ОГУ, Оренбург; 2016; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=439224> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (4 экз.)
2. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (6 экз.)
3. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
4. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
5. ; Метод молекулярной динамики в физической химии; Наука, Москва; 1996 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека
<http://www.gpntb.ru>
2. Российская национальная библиотека
<http://www.rsl.ru>
3. Публичная электронная библиотека

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

Bilbao Crystallographic server <http://www.cryst.ehu.es/>

Зональная научная библиотека УрФУ со свободным доступом по студенческому билету для студентов УрФУ (<http://lib.urfu.ru/>);

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ (<http://study.urfu.ru/>);

Официальный сайт Физико-технологического института (<http://fizteh.org/>).

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Метод молекулярной динамики

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. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	VASP 5.2 Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Регулярная и хаотическая динамика

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Зверев Владимир Владимирович, 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	Устойчивость движения	<p>Лекция 1. Нелинейные колебания. Метод фазовой плоскости. Динамические системы на плоскости. Типы стационарных (неподвижных, особых) точек. Аттракторы и репеллеры. Автономная механическая система с одной степенью свободы. Энергия как интеграл движения. Уравнение для фазовых траекторий. Фазовый портрет и его основные элементы: узлы, фокусы, седловые точки, сепаратрисы. Решение в квадратурах. Период нелинейных осцилляций.</p> <p>Лекция 2. Колебания математического маятника. Эллиптические функции. Уравнение математического маятника. Энергия маятника как интеграл движения. Фазовый портрет и линии уровня поверхности потенциальной энергии. Фinitное и инфинитное типы движения. Уравнения для сепаратрис. Решения уравнения движения в неявной форме. Неполный эллиптический интеграл первого типа. Эллиптические функции: эллиптические синус и косинус, амплитуда, дельта амплитуды. Зависимости угла и угловой скорости от времени, выраженные через эллиптические функции. Случаи фinitного и инфинитного типов движения, движения по сепаратрисе.</p>

		<p>Лекция 3. Устойчивость движения. Отображение последования. Нормальная система обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Автономная и неавтономная системы. Метрика и норма в n-мерном пространстве. Определение Ляпунова устойчивости движения. Орбитальная устойчивость. Асимптотическая устойчивость. Неустойчивость. Отображение последования или отображение Пуанкаре. Стробоскопическое отображение. Динамические отображения как динамические системы с дискретным временем.</p> <p>Лекция 4. Теорема об объеме фазовой капли. Теорема Пуанкаре-Бендиксона. Трехмерная область в фазовом пространстве (фазовая капля). Матрица Якоби. Теорема об объеме фазовой капли. Частный случай гамильтоновой системы: теорема Лиувилля о сохранении объема фазовой капли. Изменение фазового объема в случае линейного осциллятора, осциллятора Ван-дер-Поля. Теорема Пуанкаре-Бендиксона и топология фазовой плоскости.</p> <p>Лекция 5. Показатели Ляпунова. Деформации малой шарообразной фазовой капли на начальной стадии движения (случаи консервативной и диссипативной систем; устойчивого и неустойчивого движения). Описание движения по двум близким траекториям: линеаризованная система уравнений для отклонений; матрица Якоби. Показатели Ляпунова. Знак максимального показателя Ляпунова для систем с неустойчивым (хаотическим) движением. Методы вычисления показателей Ляпунова для динамических систем с непрерывным временем и динамических отображений.</p>
<p>P2</p>	<p>Структурная устойчивость</p>	<p>Лекция 6. Топологическая перестройка фазового портрета. Структурная устойчивость и грубые системы. Осциллятор с нелинейным затуханием. Уравнение Ван дер Поля. Режим устойчивых (стационарных) колебаний; предельный цикл. Поведение фазовых траекторий вблизи устойчивого предельного цикла; бассейн притяжения. Релаксационные колебания. Би-фуркация рождения предельного цикла (бифуркация Андронова-Хопфа). Нормальная (суперкритическая) и обратная (субкритическая) бифуркация рождения цикла. "Мягкое" и "жесткое" возбуждение колебаний. Гистерезис при "жестком" возбуждении. Понятие грубости (структурной устойчивости).</p> <p>Лекция 7. Теория катастроф. Перестройки структуры фазовой плоскости при бифуркациях. Бифуркационное поведение нелинейного осциллятора с двумя потенциальными ямами. Управляющие параметры. Катастрофа сборки: бистабильность, гистерезис. Динамические системы, которые описываются функцией потенциала с конечным числом управляющих параметров. Диффеоморфизмы и локальная</p>

		эквивалентность потенциалов. Лемма Морса. Лемма расщепления. Некоторые типы катастроф.
РЗ	Хаос в консервативных системах	<p>Лекция 8. Детерминизм и необратимость. Гомоклинические структуры. Детерминизм Лапласа. Проблема обратимости механического движения. Кинетическое уравнение Больцмана и H-теорема. Различные взгляды на природу необратимости (Ландау, Резибуа, Пригожин). Динамическая хаотизация (стохастизация) движения. Диссипативные структуры. Сложная динамика и перемешивание. Гомоклинические структуры Пуанкаре.</p> <p>Лекция 9. Простые модели с неустойчивой динамикой: отображение Аносова, отображение «тент», сдвиг Бернулли. Двумерное отображение Аносова, которое сохраняет площадь (отображение «кота» Арнольда). Обратимость отображения. Направления растяжения и сжатия на торе, коэффициенты растяжения и сжатия, перемешивание. Динамические отображения "тент" и сдвиг Бернулли, как частные случаи "преобразований пекаря". Качественное объяснение причины возникновения неустойчивой динамики: разбегание первоначально близких траекторий; растяжение элемента фазового пространства и перемешивание. Показатель Ляпунова для одномерного отображения. Инвариантное распределение. Преобразование двоичной дроби, вызванное отображением Бернулли.</p> <p>Лекция 10. Динамика гамильтоновых систем, близких к интегрируемым. Возмущенное движение и нелинейный резонанс. Интегрируемые и неинтегрируемые гамильтоновы системы. Простой пример системы, близкой к интегрируемой: нелинейный осциллятор под действием внешней периодической силы. Качественные преобразования фазового портрета, связанные с возникновением нелинейных резонансов различного порядка. Случай одиночного резонанса. Преобразование исходных уравнений движения к уравнению математического маятника. Величина возмущения и близость резонансов.</p> <p>Лекция 11. Отображение Заславского-Чирикова. Теория Колмогорова-Арнольда-Мозера (КАМ). Модель с периодическими дельтаобразными «толчками». Точное решение уравнений движения. Универсальное отображение Заславского-Чирикова. Разрушенные сепаратрисы и инвариантные торы. Стохастические слои. Условие перекрытия резонансов как критерий стохастизации. Стохастическая паутина и диффузия Арнольда. Теория Колмогорова-Арнольда-Мозера.</p>

<p style="text-align: center;">Р4</p>	<p style="text-align: center;">Хаос и фрактальные аттракторы в диссипативных системах</p>	<p>Лекция 12. О природе турбулентности. Модель Лоренца. Различные объяснения причин возникновения турбулентного движения. Конвекция в слое жидкости, подогреваемом снизу. Конвективные валы и ячейки Рэлея-Бенара. Переход от регулярного режима конвекции к турбулентному. Уравнения движения для модели Лоренца.</p> <p>Лекция 13. Свойства и динамика модели Лоренца. Диссипативность модели Лоренца. Ограниченность области движения в фазовом пространстве. Стационарные точки в фазовом пространстве; условия их устойчивости. Бифуркации и динамические режимы, возникающие при изменении параметра g. Рождение странного аттрактора. Качественное описание структуры странного аттрактора. Характер движения фазовой точки вдоль траектории, лежащей на аттракторе. Геометрическая форма аттрактора. Качественное объяснение причины возникновения неустойчивой динамики: разбегание первоначально близких траекторий, растяжение элемента фазового пространства и перемешивание. Отображение тент. Показатели Ляпунова.</p> <p>Лекция 14. Элементы канторовской теории множеств. Теорема Кантора и кардинальные числа. Потенциальная и актуальная бесконечность. Парадокс Зенона. Критика теории Кантора. Взаимно-однозначное соответствие. Теорема Кантора. Кардинальные числа. Линейное упорядочение множества кардинальных чисел. Формула для кардинальных чисел.</p> <p>Лекция 15. Элементы канторовской теории множеств. Основные теоремы о счетных множествах и континууме. Теорема о счетном множестве и континууме. Теорема о кардинальном числе множества рациональных чисел. Теорема о кардинальном числе многомерного континуума.</p> <p>Лекция 16. Канторова структура аттракторов Хенона и Икеды. Аналитическая теория структуры хаотического аттрактора. Триадическое множество Кантора. Самоподобие и мера (длина) множества Кантора. Доказательство континуальности множества Кантора. Дробная размерность множества Кантора. Простейшее обратимое отображение со странным (хаотическим) аттрактором. Двумерные отображения Хенона и Икеды. Численное моделирование. Канторовская структура странного аттрактора. Аналитическая теория для отображений с малым параметром. Дробная размерность аттрактора.</p> <p>Лекция 17. Математические модели фрактальных структур. Массивное канторово множество и биномиальный мультипликативный процесс. Мера на фрактальном множестве. Массивное канторовское множество. Степенной закон, описывающий связь между массой и длиной. Показатель</p>
--	---	--

Липшица-Гельдера. Фрактальная размерность Безиковича-Хаусдорфа. Биномиальный мультипликативный процесс (процесс Безиковича). Мультифрактал, сформированный путем объединения фрактальных подмножеств. Спектр размерностей, описывающий меру Безиковича. Функция распределения мультифрактального спектра. Распределение меры на мультифрактале Безиковича.

Лекция 18. Спектр фрактальных размерностей. Ляпуновская размерность. Фракталы и распределения на фрактальных носителях. Спектр обобщенных фрактальных размерностей (размерностей Реньи) для произвольного мультифрактала. Частные виды размерности Реньи: емкость; хаусдорфова, корреляционная и информационная размерности. Оценка корреляционной размерности по экспериментальным данным. Размерность Ляпунова.

Лекция 19. Показатель массы и спектральная функция. Показатель массы мультипликативного биномиального процесса. Мультипликативный биномиальный процесс на фрактальном носителе. Временная последовательность как источник данных. Асимптотические оценки интегралов. Метод Лапласа и метод наискорейшего спуска. Соотношение между показателем массы и спектральной функцией. Прямое вычисление показателя массы для мультипликативного биномиального процесса. Обобщение понятия мультипликативного биномиального процесса на случай фрактального носителя меры. Оценка размерности аттрактора по временной последовательности данных. Теорема вложения. Метод Паккарда-Такенса.

Лекция 20. Общие закономерности процесса удвоения периода в динамике одномерного отображения. Одномерные отображения с единственным гладким максимумом. Логистическое отображение. Графическое представление итерационного процесса с помощью дискретных траекторий (лестниц Ламерея). Бифуркации удвоения периодов. Траектории, соответствующие устойчивым (неустойчивым) неподвижным точкам и $2n$ -циклам, построенные на графиках основного отображения и $2n$ -отображений, $n=1,2$. Бифуркационное дерево для последовательности удвоений периода. Уравнения для бифуркационных значений управляющего параметра. Закон геометрической прогрессии и универсальная константа δ .

Лекция 21. Общие закономерности процесса удвоения периода. Универсальное одномерное отображение. Открытие Фейгенбаумом универсальных законов в итерационных последовательностях. Универсальная константа α .

		<p>Самоподобие в геометрии дерева бифуркаций. Универсальные отображения, определяемые предельными формулами.</p> <p>Лекция 22. Уравнение Фейгенбаума-Цвитановича. Бесконечное семейство универсальных функций. графики этих функций. Оператор удвоения (оператор преобразования ренормализационной группы). Уравнение Фейгенбаума-Цвитановича для стационарной точки. Нормировка универсальных функций. Графики универсальных функций. Свойства универсальных отображений. Полиномиальная аппроксимация для универсальной функции. Действие оператора удвоения на функцию, близкую к универсальной, в линейном приближении. Доказательство закона геометрической прогрессии.</p> <p>Лекция 23. Универсальная закономерность в организации циклов. Самоподобие в расположении элементов суперциклов. Функция «сигма». Закономерности в поведении этой функции. Фрактальный характер функции «сигма».</p> <p>Лекция 24. Универсальный спектр мощности.</p> <p>Итерационная последовательность как «сигнал» (временная последовательность). Преобразование Фурье. Уравнения для коэффициентов Фурье. Оценка отношения интенсивности субгармоники к интенсивности основной гармоники. Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными.</p> <p>Лекция 25. Синхронизация хаотических осцилляций. Синхронизация в системе двух связанных одномерных отображений. Показатели Ляпунова, характеризующие совместную динамику и связь. Сбой фазы. Модуляционная перемежаемость. Типы и критерии синхронизации. Функция подобия. Взаимная корреляционная функция. Функция когерентности. Лаг-синхронизация.</p>
<p>P5</p>	<p>Компьютерное моделирование</p>	<p>Лабораторная работа 1. Трехмерное моделирование динамики в фазовом пространстве.</p> <p>Лабораторная работа 2. Структура аттрактора Хенона.</p> <p>Лабораторная работа 3. Максимальный показатель Ляпунова.</p> <p>Лабораторная работа 4. Последовательность Фейгенбаума удвоения периода.</p>

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Регулярная и хаотическая динамика

Электронные ресурсы (издания)

1. Андронов, А. А., Железцов, Н. А.; Теория колебаний; Наука, Москва; 1981; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=123658> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Зверев, В. В., Мазуренко, В. Г.; Регулярная и хаотическая динамика в системах различной природы : курс лекций.; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2009 (11 экз.)
2. Баутин, Н. Н., Леонтович-Андропова, Е. А.; Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости; Наука, Москва; 1990 (33 экз.)
3. Рабинович, М. И.; Введение в теорию колебаний и волн; РХД, Москва; 2000 (5 экз.)
4. Шустер, Г. Г., Израйлев, Ф. М., Малкин, М. И., Рейман, А. М., Гапонов-Грехов, А. В., Рабинович, М. И.; Детерминированный хаос. Введение; Мир, Москва; 1988 (3 экз.)
5. Анищенко, В. С., Астахов, В. В., Вадивасова, Т. Е.; Регулярные и хаотические автоколебания. Синхронизация и влияние флуктуаций : [учеб.-моногр.]; Интеллект, Долгопрудный; 2009 (6 экз.)
6. Кузнецов, С. П.; Динамический хаос : Курс лекций: Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по физ. специальностям.; Физматлит, Москва; 2001 (5 экз.)
7. Берже, П.; Порядок в хаосе. О детерминистском подходе к турбулентности : пер. с фр.; Мир, Москва; 1991 (2 экз.)
8. Федер, Е., Данилов, Ю. А., Шукуров, А.; Фракталы; Мир, Москва; 1991 (2 экз.)
9. Хакен, Г., Климонтович, Ю. Л., Осовец, С. М., Емельянов, В. И.; Синергетика; Мир, Москва; 1980 (7 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека. Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>
2. Список библиотек, доступных в Интернет и входящих в проект «Либнет». Режим до-ступа: <http://www.valley.ru/-nicr/listrum.htm>
3. Российская национальная библиотека. Режим доступа: <http://www.rsl.ru>
4. 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

1. Библиотека нормативно-технической литературы. Режим доступа: <http://www.tehlit.ru>
2. Библиотека В. Г. Белинского. Режим доступа: <http://book.uraic.ru>
3. Саратовский университет: группа теоретической нелинейной динамики. Режим доступа: <http://www.sgtnd.narod.ru/rus/index.htm>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Регулярная и хаотическая динамика

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. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

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
1153279	Моделирование реальных процессов

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 Моделирование реальных процессов

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает две дисциплины – "Метод молекулярной динамики" и "Регулярная и хаотическая динамика". В дисциплине "Регулярная и хаотическая динамика" вводятся понятия устойчивости движения и структурной устойчивости динамических систем. Описаны методы вычисления показателей Ляпунова. Кратко изложены основные понятия и результаты теории катастроф. Рассматривается неустойчивая динамика в неинтегрируемых консервативных и диссипативных системах: гамильтонов хаос в модели Заславского-Чирикова, диссипативный хаос в непрерывной модели Лоренца, дискретных моделях Хенона и Икеды. Даны основы теории мультифрактальной структуры хаотических аттракторов, возникающих в динамике нелинейных диссипативных систем. В дисциплине «Метод молекулярной динамики» рассматриваются базовые принципы моделирования атомной структуры различных классов твердых тел. В рамках части, посвященной классической молекулярной динамике, анализируются как простейшие виды межатомных потенциалов, например, потенциал Леннарда-Джонса так и более сложные виды потенциалов с большим числом параметров. Особое внимание уделяется теоретическому и численному описанию систем с беспорядком. Полноценное освоение материала достигается за счет выполнения ряда лабораторных работ. Во второй части курса рассматриваются базовые подходы первопринципной молекулярной динамики, вопросы построения универсальных межатомных потенциалов при помощи технологий машинного обучения.

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	Метод молекулярной динамики	3
2	Регулярная и хаотическая динамика	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
Метод молекулярной динамики	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>
	УК-3 - Способен организовать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели	<p>З-3 - Характеризовать виды командных стратегий, факторы формирования успешной команды для эффективной деятельности</p> <p>У-3 - Анализировать виды командных стратегий для достижения целей работы команды</p> <p>П-2 - Обосновать выбор членов команды и распределения полномочий (функций) ее членов, координировать взаимодействия членов команды</p> <p>Д-2 - Демонстрировать умение эффективно работать в команде</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</p>

		исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники
ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности		<p>З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Выбирать и использовать современные ИТ-технологии и базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Иметь опыт сбора, анализа и обработки информации при решении задач профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий и баз данных</p>
ПК-2 - Способен осуществлять эффективное управление разработкой программных средств и проектов		<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>
ПК-3 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок		<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>
Регулярная и хаотическая динамика	<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>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</p>

		<p>соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и 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>

		П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники
--	--	---

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Метод молекулярной динамики

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико- математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- 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	Основные задачи, решаемые методом МД	Вычисление средних по ансамблю и термодинамических величин
P2	Классический метод МД	Классические уравнения движения и методы интегрирования. Алгоритм Верле. Метод «предсказаний и поправок». Метод средней точки. Прыжковый метод. Метод Эйлера-Ричардсона
P3	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. Способы контроля внешних параметров при использовании метода МД.
P4	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.
P5	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

Таблица 1.2

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Метод молекулярной динамики

Электронные ресурсы (издания)

1. Кручинин, Н. Ю.; Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах : учебное пособие.; ОГУ, Оренбург; 2016; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=439224> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (4 экз.)
2. Гулд, Х., Панченко, В. А., Полюдов, Е. Н.; Компьютерное моделирование в физике : [В 2 ч.]. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (6 экз.)
3. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
4. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)
5. ; Метод молекулярной динамики в физической химии; Наука, Москва; 1996 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека
<http://www.gpntb.ru>
2. Российская национальная библиотека
<http://www.rsl.ru>
3. Публичная электронная библиотека

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

Bilbao Crystallographic server <http://www.cryst.ehu.es/>

Зональная научная библиотека УрФУ со свободным доступом по студенческому билету для студентов УрФУ (<http://lib.urfu.ru/>);

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ (<http://study.urfu.ru/>);

Официальный сайт Физико-технологического института (<http://fizteh.org/>).

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Метод молекулярной динамики

Сведения об оснащенности дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	VASP 5.2 Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Регулярная и хаотическая динамика

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Зверев Владимир Владимирович, 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	Устойчивость движения	<p>Лекция 1. Нелинейные колебания. Метод фазовой плоскости. Динамические системы на плоскости. Типы стационарных (неподвижных, особых) точек. Аттракторы и репеллеры. Автономная механическая система с одной степенью свободы. Энергия как интеграл движения. Уравнение для фазовых траекторий. Фазовый портрет и его основные элементы: узлы, фокусы, седловые точки, сепаратрисы. Решение в квадратурах. Период нелинейных осцилляций.</p> <p>Лекция 2. Колебания математического маятника. Эллиптические функции. Уравнение математического маятника. Энергия маятника как интеграл движения. Фазовый портрет и линии уровня поверхности потенциальной энергии. Фinitное и инфинитное типы движения. Уравнения для сепаратрис. Решения уравнения движения в неявной форме. Неполный эллиптический интеграл первого типа. Эллиптические функции: эллиптические синус и косинус, амплитуда, дельта амплитуды. Зависимости угла и угловой скорости от времени, выраженные через эллиптические функции. Случаи фinitного и инфинитного типов движения, движения по сепаратрисе.</p>

		<p>Лекция 3. Устойчивость движения. Отображение последования. Нормальная система обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Автономная и неавтономная системы. Метрика и норма в n-мерном пространстве. Определение Ляпунова устойчивости движения. Орбитальная устойчивость. Асимптотическая устойчивость. Неустойчивость. Отображение последования или отображение Пуанкаре. Стробоскопическое отображение. Динамические отображения как динамические системы с дискретным временем.</p> <p>Лекция 4. Теорема об объеме фазовой капли. Теорема Пуанкаре-Бендиксона. Трехмерная область в фазовом пространстве (фазовая капля). Матрица Якоби. Теорема об объеме фазовой капли. Частный случай гамильтоновой системы: теорема Лиувилля о сохранении объема фазовой капли. Изменение фазового объема в случае линейного осциллятора, осциллятора Ван-дер-Поля. Теорема Пуанкаре-Бендиксона и топология фазовой плоскости.</p> <p>Лекция 5. Показатели Ляпунова. Деформации малой шарообразной фазовой капли на начальной стадии движения (случаи консервативной и диссипативной систем; устойчивого и неустойчивого движения). Описание движения по двум близким траекториям: линеаризованная система уравнений для отклонений; матрица Якоби. Показатели Ляпунова. Знак максимального показателя Ляпунова для систем с неустойчивым (хаотическим) движением. Методы вычисления показателей Ляпунова для динамических систем с непрерывным временем и динамических отображений.</p>
<p>P2</p>	<p>Структурная устойчивость</p>	<p>Лекция 6. Топологическая перестройка фазового портрета. Структурная устойчивость и грубые системы. Осциллятор с нелинейным затуханием. Уравнение Ван дер Поля. Режим устойчивых (стационарных) колебаний; предельный цикл. Поведение фазовых траекторий вблизи устойчивого предельного цикла; бассейн притяжения. Релаксационные колебания. Би-фуркация рождения предельного цикла (бифуркация Андронова-Хопфа). Нормальная (суперкритическая) и обратная (субкритическая) бифуркация рождения цикла. "Мягкое" и "жесткое" возбуждение колебаний. Гистерезис при "жестком" возбуждении. Понятие грубости (структурной устойчивости).</p> <p>Лекция 7. Теория катастроф. Перестройки структуры фазовой плоскости при бифуркациях. Бифуркационное поведение нелинейного осциллятора с двумя потенциальными ямами. Управляющие параметры. Катастрофа сборки: бистабильность, гистерезис. Динамические системы, которые описываются функцией потенциала с конечным числом управляющих параметров. Диффеоморфизмы и локальная</p>

		эквивалентность потенциалов. Лемма Морса. Лемма расщепления. Некоторые типы катастроф.
РЗ	Хаос в консервативных системах	<p>Лекция 8. Детерминизм и необратимость. Гомоклинические структуры. Детерминизм Лапласа. Проблема обратимости механического движения. Кинетическое уравнение Больцмана и H-теорема. Различные взгляды на природу необратимости (Ландау, Резибуа, Пригожин). Динамическая хаотизация (стохастизация) движения. Диссипативные структуры. Сложная динамика и перемешивание. Гомоклинические структуры Пуанкаре.</p> <p>Лекция 9. Простые модели с неустойчивой динамикой: отображение Аносова, отображение «тент», сдвиг Бернулли. Двумерное отображение Аносова, которое сохраняет площадь (отображение «кота» Арнольда). Обратимость отображения. Направления растяжения и сжатия на торе, коэффициенты растяжения и сжатия, перемешивание. Динамические отображения "тент" и сдвиг Бернулли, как частные случаи "преобразований пекаря". Качественное объяснение причины возникновения неустойчивой динамики: разбегание первоначально близких траекторий; растяжение элемента фазового пространства и перемешивание. Показатель Ляпунова для одномерного отображения. Инвариантное распределение. Преобразование двоичной дроби, вызванное отображением Бернулли.</p> <p>Лекция 10. Динамика гамильтоновых систем, близких к интегрируемым. Возмущенное движение и нелинейный резонанс. Интегрируемые и неинтегрируемые гамильтоновы системы. Простой пример системы, близкой к интегрируемой: нелинейный осциллятор под действием внешней периодической силы. Качественные преобразования фазового портрета, связанные с возникновением нелинейных резонансов различного порядка. Случай одиночного резонанса. Преобразование исходных уравнений движения к уравнению математического маятника. Величина возмущения и близость резонансов.</p> <p>Лекция 11. Отображение Заславского-Чирикова. Теория Колмогорова-Арнольда-Мозера (КАМ). Модель с периодическими дельтаобразными «толчками». Точное решение уравнений движения. Универсальное отображение Заславского-Чирикова. Разрушенные сепаратрисы и инвариантные торы. Стохастические слои. Условие перекрытия резонансов как критерий стохастизации. Стохастическая паутина и диффузия Арнольда. Теория Колмогорова-Арнольда-Мозера.</p>

<p style="text-align: center;">Р4</p>	<p style="text-align: center;">Хаос и фрактальные аттракторы в диссипативных системах</p>	<p>Лекция 12. О природе турбулентности. Модель Лоренца. Различные объяснения причин возникновения турбулентного движения. Конвекция в слое жидкости, подогреваемом снизу. Конвективные валы и ячейки Рэлея-Бенара. Переход от регулярного режима конвекции к турбулентному. Уравнения движения для модели Лоренца.</p> <p>Лекция 13. Свойства и динамика модели Лоренца. Диссипативность модели Лоренца. Ограниченность области движения в фазовом пространстве. Стационарные точки в фазовом пространстве; условия их устойчивости. Бифуркации и динамические режимы, возникающие при изменении параметра g. Рождение странного аттрактора. Качественное описание структуры странного аттрактора. Характер движения фазовой точки вдоль траектории, лежащей на аттракторе. Геометрическая форма аттрактора. Качественное объяснение причины возникновения неустойчивой динамики: разбегание первоначально близких траекторий, растяжение элемента фазового пространства и перемешивание. Отображение тент. Показатели Ляпунова.</p> <p>Лекция 14. Элементы канторовской теории множеств. Теорема Кантора и кардинальные числа. Потенциальная и актуальная бесконечность. Парадокс Зенона. Критика теории Кантора. Взаимно-однозначное соответствие. Теорема Кантора. Кардинальные числа. Линейное упорядочение множества кардинальных чисел. Формула для кардинальных чисел.</p> <p>Лекция 15. Элементы канторовской теории множеств. Основные теоремы о счетных множествах и континууме. Теорема о счетном множестве и континууме. Теорема о кардинальном числе множества рациональных чисел. Теорема о кардинальном числе многомерного континуума.</p> <p>Лекция 16. Канторова структура аттракторов Хенона и Икеды. Аналитическая теория структуры хаотического аттрактора. Триадическое множество Кантора. Самоподобие и мера (длина) множества Кантора. Доказательство континуальности множества Кантора. Дробная размерность множества Кантора. Простейшее обратимое отображение со странным (хаотическим) аттрактором. Двумерные отображения Хенона и Икеды. Численное моделирование. Канторовская структура странного аттрактора. Аналитическая теория для отображений с малым параметром. Дробная размерность аттрактора.</p> <p>Лекция 17. Математические модели фрактальных структур. Массивное канторово множество и биномиальный мультипликативный процесс. Мера на фрактальном множестве. Массивное канторовское множество. Степенной закон, описывающий связь между массой и длиной. Показатель</p>
--	---	--

Липшица-Гельдера. Фрактальная размерность Безиковича-Хаусдорфа. Биномиальный мультипликативный процесс (процесс Безиковича). Мультифрактал, сформированный путем объединения фрактальных подмножеств. Спектр размерностей, описывающий меру Безиковича. Функция распределения мультифрактального спектра. Распределение меры на мультифрактале Безиковича.

Лекция 18. Спектр фрактальных размерностей. Ляпуновская размерность. Фракталы и распределения на фрактальных носителях. Спектр обобщенных фрактальных размерностей (размерностей Реньи) для произвольного мультифрактала. Частные виды размерности Реньи: емкость; хаусдорфова, корреляционная и информационная размерности. Оценка корреляционной размерности по экспериментальным данным. Размерность Ляпунова.

Лекция 19. Показатель массы и спектральная функция. Показатель массы мультипликативного биномиального процесса. Мультипликативный биномиальный процесс на фрактальном носителе. Временная последовательность как источник данных. Асимптотические оценки интегралов. Метод Лапласа и метод наискорейшего спуска. Соотношение между показателем массы и спектральной функцией. Прямое вычисление показателя массы для мультипликативного биномиального процесса. Обобщение понятия мультипликативного биномиального процесса на случай фрактального носителя меры. Оценка размерности аттрактора по временной последовательности данных. Теорема вложения. Метод Паккарда-Такенса.

Лекция 20. Общие закономерности процесса удвоения периода в динамике одномерного отображения. Одномерные отображения с единственным гладким максимумом. Логистическое отображение. Графическое представление итерационного процесса с помощью дискретных траекторий (лестниц Ламерея). Бифуркации удвоения периодов. Траектории, соответствующие устойчивым (неустойчивым) неподвижным точкам и $2n$ -циклам, построенные на графиках основного отображения и $2n$ -отображений, $n=1,2$. Бифуркационное дерево для последовательности удвоений периода. Уравнения для бифуркационных значений управляющего параметра. Закон геометрической прогрессии и универсальная константа δ .

Лекция 21. Общие закономерности процесса удвоения периода. Универсальное одномерное отображение. Открытие Фейгенбаумом универсальных законов в итерационных последовательностях. Универсальная константа α .

		<p>Самоподобие в геометрии дерева бифуркаций. Универсальные отображения, определяемые предельными формулами.</p> <p>Лекция 22. Уравнение Фейгенбаума-Цвитановича. Бесконечное семейство универсальных функций. графики этих функций. Оператор удвоения (оператор преобразования ренормализационной группы). Уравнение Фейгенбаума-Цвитановича для стационарной точки. Нормировка универсальных функций. Графики универсальных функций. Свойства универсальных отображений. Полиномиальная аппроксимация для универсальной функции. Действие оператора удвоения на функцию, близкую к универсальной, в линейном приближении. Доказательство закона геометрической прогрессии.</p> <p>Лекция 23. Универсальная закономерность в организации циклов. Самоподобие в расположении элементов суперциклов. Функция «сигма». Закономерности в поведении этой функции. Фрактальный характер функции «сигма».</p> <p>Лекция 24. Универсальный спектр мощности.</p> <p>Итерационная последовательность как «сигнал» (временная последовательность). Преобразование Фурье. Уравнения для коэффициентов Фурье. Оценка отношения интенсивности субгармоники к интенсивности основной гармоники. Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными.</p> <p>Лекция 25. Синхронизация хаотических осцилляций. Синхронизация в системе двух связанных одномерных отображений. Показатели Ляпунова, характеризующие совместную динамику и связь. Сбой фазы. Модуляционная перемежаемость. Типы и критерии синхронизации. Функция подобия. Взаимная корреляционная функция. Функция когерентности. Лаг-синхронизация.</p>
<p>P5</p>	<p>Компьютерное моделирование</p>	<p>Лабораторная работа 1. Трехмерное моделирование динамики в фазовом пространстве.</p> <p>Лабораторная работа 2. Структура аттрактора Хенона.</p> <p>Лабораторная работа 3. Максимальный показатель Ляпунова.</p> <p>Лабораторная работа 4. Последовательность Фейгенбаума удвоения периода.</p>

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Регулярная и хаотическая динамика

Электронные ресурсы (издания)

1. Андронов, А. А., Железцов, Н. А.; Теория колебаний; Наука, Москва; 1981; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=123658> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Зверев, В. В., Мазуренко, В. Г.; Регулярная и хаотическая динамика в системах различной природы : курс лекций.; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2009 (11 экз.)
2. Баутин, Н. Н., Леонтович-Андропова, Е. А.; Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости; Наука, Москва; 1990 (33 экз.)
3. Рабинович, М. И.; Введение в теорию колебаний и волн; РХД, Москва; 2000 (5 экз.)
4. Шустер, Г. Г., Израйлев, Ф. М., Малкин, М. И., Рейман, А. М., Гапонов-Грехов, А. В., Рабинович, М. И.; Детерминированный хаос. Введение; Мир, Москва; 1988 (3 экз.)
5. Анищенко, В. С., Астахов, В. В., Вадивасова, Т. Е.; Регулярные и хаотические автоколебания. Синхронизация и влияние флуктуаций : [учеб.-моногр.]; Интеллект, Долгопрудный; 2009 (6 экз.)
6. Кузнецов, С. П.; Динамический хаос : Курс лекций: Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по физ. специальностям.; Физматлит, Москва; 2001 (5 экз.)
7. Берже, П.; Порядок в хаосе. О детерминистском подходе к турбулентности : пер. с фр.; Мир, Москва; 1991 (2 экз.)
8. Федер, Е., Данилов, Ю. А., Шукуров, А.; Фракталы; Мир, Москва; 1991 (2 экз.)
9. Хакен, Г., Климонтович, Ю. Л., Осовец, С. М., Емельянов, В. И.; Синергетика; Мир, Москва; 1980 (7 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека. Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>
2. Список библиотек, доступных в Интернет и входящих в проект «Либнет». Режим до-ступа: <http://www.valley.ru/-nicr/listrum.htm>
3. Российская национальная библиотека. Режим доступа: <http://www.rsl.ru>
4. 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

1. Библиотека нормативно-технической литературы. Режим доступа: <http://www.tehlit.ru>
2. Библиотека В. Г. Белинского. Режим доступа: <http://book.uraic.ru>
3. Саратовский университет: группа теоретической нелинейной динамики. Режим доступа: <http://www.sgtnd.narod.ru/rus/index.htm>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Регулярная и хаотическая динамика

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. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES