

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
1159008	Алгоритмы и методы моделирования физических систем

Екатеринбург

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

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
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 Алгоритмы и методы моделирования физических систем

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает в себя дисциплины: «Высокопроизводительные вычисления», «Моделирование электронной структуры твердых тел», «Нейросетевые методы исследования физических систем». В рамках курса «Высокопроизводительные вычисления» предлагается практическое освоение следующих разделов параллельного программирования: архитектурные принципы реализации параллельной обработки в вычислительных машинах; методы и языковые механизмы конструирования параллельных программ; параллельные вычислительные методы. В курсе «Моделирование электронной структуры твердых тел» рассматриваются современные численные методы для анализа и описания физических свойств современных материалов. Значительное внимание уделяется непосредственному освоению студентами пакетов программ для моделирования твердых тел и проведения своих собственных независимых исследований. В курсе освещаются как первопринципные методы теории функционала электронной плотности, так и передовые многочастичные подходы, основанные на теории динамического среднего поля. Дисциплина «Нейросетевые методы исследования физических систем» служит связующим звеном между теорией машинного обучения и физикой конденсированного состояния. Рассматривается история развития алгоритмов, их классификация, а также преимущества, недостатки и область применимости. Подробно изучаются как простейшие методы машинного обучения, такие как линейная регрессия и метод опорных векторов (SVM), так и различные нейронные сети. Особое внимание уделяется применению рассмотренных алгоритмов для решения задач, стоящих перед современной физикой конденсированного состояния, включая определение фазового состава рассматриваемой системы и параметров гамильтониана, нахождение атомных потенциалов и функционала электронной плотности, восстановление волновой функции квантовой системы и др..

## 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	Моделирование электронной структуры твердых тел	5
2	Нейросетевые методы исследования физических систем	4
3	Высокопроизводительные вычисления	3
ИТОГО по модулю:		12

## 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
Высокопроизводительные вычисления	УК-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	<p>З-1 - Демонстрировать понимание процессов управления проектом, планирования ресурсов, критерии оценки рисков и результатов проектной деятельности</p> <p>З-2 - Формулировать основные принципы формирования концепции проекта в сфере профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Формулировать актуальность, цели, задачи, обосновывать значимость проекта, выбирать стратегию для разработки концепции проекта в рамках обозначенной проблемы</p> <p>У-2 - Прогнозировать ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в зависимости от типа проекта</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-1 - Составлять план проекта и график реализации, разрабатывать мероприятия по контролю его выполнения и оценки результатов проекта</p> <p>Д-1 - Проявлять способность к поиску новой информации, умение принимать решения в нестандартных ситуациях</p>
	УК-7 - Способен обрабатывать, анализировать, передавать данные и информацию с использованием цифровых средств для эффективного решения	<p>З-1 - Сделать обзор угроз информационной безопасности, основных принципов организации безопасной работы в информационных системах и в сети интернет</p> <p>З-2 - Описать способы и средства защиты персональных данных и данных в</p>

	<p>поставленных задач с учетом требований информационной безопасности</p>	<p>организации в соответствии с действующим законодательством</p> <p>З-3 - Сделать обзор современных цифровых средств и технологий, используемых для обработки, анализа и передачи данных при решении поставленных задач</p> <p>У-1 - Определять основные угрозы безопасности при использовании информационных технологий и выбирать оптимальные способы и средства защиты персональных данных и данных организации от мошенников и вредоносного ПО</p> <p>У-2 - Выбирать современные цифровые средства и технологии для обработки, анализа и передачи данных с учетом поставленных задач</p> <p>П-1 - Обосновать выбор технических и программных средств защиты персональных данных и данных организации при работе с информационными системами на основе анализа потенциальных и реальных угроз безопасности информации</p> <p>П-2 - Решать поставленные задачи, используя эффективные цифровые средства и средства информационной безопасности</p>
	<p>ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности</p>	<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>

		Д-1 - Демонстрировать аналитические и системные умения, способность к поиску информации
	ПК-2 - Способен осуществлять эффективное управление разработкой программных средств и проектов	<p>З-1 - Демонстрировать понимание архитектуры и принципов построения программного обеспечения и виды архитектуры программного обеспечения</p> <p>З-2 - Классифицировать типовые решения, библиотеки программных модулей, шаблоны, классы объектов, используемые при разработке программного обеспечения</p> <p>У-1 - Использовать типовые решения и шаблоны разработки 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>
Моделирование электронной структуры твердых тел	УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде	<p>З-1 - Демонстрировать понимание основных методов системного подхода и критического анализа проблемных ситуаций</p> <p>З-2 - Определять этапы разработки стратегии действий, в том числе в цифровой среде, и методы решения проблемных ситуаций</p> <p>У-1 - Выявлять проблемные ситуации, используя методы системного подхода и критического анализа</p> <p>У-2 - Обосновывать выбор стратегии для достижения поставленной цели, в том числе в цифровой среде, с учетом ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>У-3 - Анализировать проблемную ситуацию, выявлять и определять способы ее разрешения</p> <p>П-1 - Использовать эффективные стратегии действий для решения проблемной ситуации, в том числе в цифровой среде, с</p>

		<p>учетом оценки ограничений, рисков и моделируемых результатов</p> <p>П-2 - Использовать методы критического анализа и системного подхода в разработке стратегии действий для решения проблемных ситуаций, в том числе в цифровой среде</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические способности и критическое мышление</p>
	<p>УК-3 - Способен организовать и руководить работой команды, выработывая командную стратегию для достижения поставленной цели</p>	<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>
	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>

	<p>ОПК-5 - Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание правил оформления различных видов и способов представления результатов: научных и научно-технических отчетов, презентаций, публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров), стилей и норм научного письма на русском и английском языках</p> <p>У-1 - Оценивать выполненные отчеты, презентации, научные публикации (доклады, статьи, тезисы к конференциям, обзоры) на соответствие нормам научного письма на русском и английском языках</p> <p>П-2 - Иметь опыт подготовки выступлений и ведения профессиональных дискуссий, выступлений на семинарах и/или конференциях</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность в подготовке материалов научных исследований к публичному доступу</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>З-2 - Соотнести и классифицировать методы и средства математической обработки результатов расчетных и экспериментальных данных</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>Нейросетевые методы исследования физических</p>	<p>УК-2 - Способен управлять проектом на</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание процессов управления проектом, планирования ресурсов, критерии оценки</p>



систем	всех этапах его жизненного цикла	<p>рисков и результатов проектной деятельности</p> <p>У-1 - Формулировать актуальность, цели, задачи, обосновывать значимость проекта, выбирать стратегию для разработки концепции проекта в рамках обозначенной проблемы</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-1 - Составлять план проекта и график реализации, разрабатывать мероприятия по контролю его выполнения и оценки результатов проекта</p> <p>Д-1 - Проявлять способность к поиску новой информации, умение принимать решения в нестандартных ситуациях</p>
	ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	ОПК-4 - Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и	<p>З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных,</p>

	<p>вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности</p>	<p>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> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические и системные умения, способность к поиску информации</p>
	<p>ОПК-5 - Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде докладов на российских и международных конференциях</p>	<p>З-2 - Соотносить правила проведения профессиональных дискуссий с их характером, и демонстрировать понимание особенностей научных дискуссий</p> <p>У-2 - Сформулировать аргументы для защиты результатов профессиональной деятельности в публичном пространстве</p> <p>П-1 - Иметь опыт подготовки и оформления отчетов, презентаций, научных публикаций (докладов, статей, тезисов к конференциям, обзоров) по результатам деятельности в соответствии с правилами и нормами письма на русском и английском языках</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>З-3 - Сделать обзор методов и средств проектирования программного обеспечения</p> <p>У-1 - Использовать типовые решения и шаблоны разработки 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</p>

		экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники
	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>

### 1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Моделирование электронной структуры**  
**твердых тел**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 6 от 11.02.2022 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

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

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

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

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

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

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Приближение самосогласованного поля	Квантовая теория системы многих электронов и приближение самосогласованного поля. Атомная система единиц, Уравнения Хартри-Фока. Обменное взаимодействие.
P2	Метод функционала плотности	Приближение локальной плотности. Обменно-корреляционная энергия. Числа заполнения и одночастичные энергии. Переходное состояние. Решение атомной задачи. Разделение угловых и радиальных переменных в сферическом потенциале. Радиальное уравнение Шредингера. Численное решение радиального уравнения Шредингера.
P3	Блоховские функции	Кристаллическая решетка. Прямая и обратная решетки. Ячейка Вингера-Зейца. Зона Брюллюэна. Обратная решетка и разложение в ряд Фурье периодических функций в кристалле. Блоховские функции. Теорема Блоха. Периодические и граничные условия. Разрешенные значения волнового вектора. Периодичность в обратном пространстве собственной энергии
P4	Описание электронной структуры	Приближение почти свободных электронов и метод плоских волн. Ортогонализированные плоские волны и псевдопотенциал. Осцилляция волновой функции в области остова. Псевдоволновая функция и псевдопотенциал. Проекционный оператор. Модельный псевдопотенциал. Метод сильной связи. Молекулярные орбитали. Секулярное уравнение.

P5	Современные методы расчета электронной структуры	Метод присоединенных плоских волн. "Muffin-tin" (MT) приближение кристаллического потенциала. «Сшивка» плоской волны с решением уравнения Шредингера внутри сферы. Метод ККР. Функция Грина. Интегральное уравнение. Структурные константы. Фазовые сдвиги. Плотность состояний и интегрирование в обратном пространстве методом тетраэдров. Линеаризованные методы. Приближение атомной сферы. MT-орбитали. Метод ККР в приближении атомной сферы. Метод ЛМТО. Линеаризация зависимости от энергии радиальной волновой функции. Матричные элементы гамильтониана и матрицы перекрытия. Ортогональный метод ЛМТО. Зависимость от энергии логарифмической производной и потенциальной функции. Преобразование уравнений метода ККР в приближении атомной сферы к виду, содержащему независимую от энергии матрицу гамильтониана
----	--	--

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование электронной структуры твердых тел

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Изюмов, Ю. А.; Электронная структура соединений с сильными корреляциями : монография.; НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Москва, Ижевск; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=467651> (Электронное издание)
2. Гусев, А. И.; Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии : монография.; Физматлит, Москва; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68859> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Ландау, Л. Д., Пиастровский, Л. П.; Теоретическая физика : Учеб. пособие для физ. спец. ун-тов : В 10 т. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория.- 4-е изд., испр. ; Наука, Москва; 1989 (34 экз.)
2. Изюмов, Ю. А.; Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2006 (1 экз.)
3. Харрисон, У. А., Уолтер А., Ипатова, И. П., Китаев, Ю. Э., Алферов, Ж. И.; Т. 1 : в 2 томах.; Мир, Москва; 1983 (19 экз.)
4. Харрисон, У. А., Уолтер А., Ипатова, И. П., Китаев, Ю. Э., Алферов, Ж. И.; Т. 2 : в 2 томах.; Мир, Москва; 1983 (21 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

[www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)

[www.iop.org](http://www.iop.org)

### Материалы для лиц с ОВЗ

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

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Анисимов В.И., Мазуренко В.Г. Компьютерные технологии в науке. УМК-Д. 2007 г.

K.Held. Electronic structure calculation using dynamical mean field theory. // Advances in Physics, 56, 829-926 (2007)

Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев. Материалы с сильными электронными корреляциями. // УФН, т.178, №1, с.25-61 (2008)

Ю.А. Изюмов. Сильно-коррелированные электроны: t-J модель. // УФН, т.40, №5, с.445-476 (1997)

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование электронной структуры твердых тел

Сведения об оснащении 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
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Matlab R2008a
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Matlab+Simulink

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Нейросетевые методы исследования**  
**физических систем**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 6 от 11.02.2022 г.



# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

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

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

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

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

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

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Базовые понятия теории машинного обучения и математической статистики	Базовые формулы статистики. Описание случай-ной величины на основе ее математического ожида-ния и дисперсии. Корреляция и ковариация, довери-тельные интервалы. Вероятность и правдоподобие, поиск оптимальных параметров распределения на основе алгоритма максимизации правдоподобия.  Классификация алгоритмов машинного обучения, основные типы решаемых задач и способы настройки параметров. Предварительная обработка данных. Стандартизация и алгоритмы семплирования.
P2	Алгоритмы, обучающиеся с учителем	Линейная регрессия, оптимизация параметров методом наименьших квадратов. Основная область применения алгоритма и ограничения. Модификация регрессии добавлением регуляризационного члена, накладывающего ограничения на коэффициенты. Полиномиальная регрессия, описание не-линейной динамики системы.  Метод опорных векторов. Случаи линейной разделимости и не разделимости данных. Переход в спрямляющее пространство, ядро преобразования. Связь метода с простейшей нейронной сетью.  Методы ближайших соседей. Определение ближайших соседей при помощи перебора и построения деревьев. Область применения данных алгоритмов и их ограничения. Метод K-

		<p>ближайших соседей в задачах классификации и регрессии. Классификация на основе центроид. Переход от Евклидовой метрики к более эффективной при помощи алгоритма Neighborhood Components Analysis.</p> <p>Деревья решений. Особенности построения деревьев для различного типа входных данных.</p> <p>Методы ансамблей. Случайный лес и классификация на основе голосования. Adaptive Boosting и Gradient Boosting алгоритмы, особенности их обучения и область применимости</p>
Р3	Алгоритмы, обучающиеся без учителя	<p>Снижение размерности данных. Анализ главных компонент на основе диагонализации ковариационной матрицы и сингулярного разложения, простой итерационный алгоритм. Оценка доли сохраненной информации при переходе в новое пространство.</p> <p>Низкоразмерная визуализация данных при помощи алгоритма t-SNE, важные параметры метода и описание получаемых результатов. Расстояние Кульбака-Лейблера.</p> <p>Кластеризация данных. Алгоритм К-средних, особенности работы и обучения. Метод сдвига среднего, как модификация на случай неизвестного количества кластеров в данных. Алгоритмы, основанные на анализе плотности данных и не делающие предположение об изотропной структуре кластеров.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе сравнения полученных меток с исходными. Индекс Рэнда, взаимная информация, однородность, полнота и V-мера.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе анализа структуры данных. Коэффициент Силуэта, индекс Калински-Харабаса, индекс Дэвиса-Болдина.</p>
Р4	Нейронные сети	<p>Базовые понятия. Нейрон, синапс, функция активации, входные и выходные данные, функция потерь. Типы функций активации, советы по их использованию. Обзор существующих архитектур.</p> <p>Обзор исторически важных архитектур нейронных сетей. Перцептрон, особенности работы и аппаратная реализация. Алгоритм коррекции ошибки, теорема сходимости перцептрона. Обучение на примере логической функции XOR. Нейронная сеть Хопфилда, структура, особенности работы, обучение. Восстановление поврежденных образов. Предел памяти сети. Нейронная сеть Кохонена, примеры использования, геометрическая интерпретация.</p> <p>Нейронная сеть прямого распространения, предназначение и принципы работы. Алгоритм обратного распространения ошибки, стохастический градиентный спуск, скорость обучения и момент. Определение параметров оптимизационной процедуры на основе перекрестной проверки.</p>

		<p>Сверточная нейронная сеть. История исследования зрительной зоны головного мозга. Основные понятия: фильтр, карта признаков, рецептивное поле, свертка, подвыборка. Структура сети и принципы ее работы. Некоторые стандартны фильтры: определение границ, размытие, повышение резкости. Модификация метода обратного распространения ошибки.</p> <p>Рекуррентные нейронные сети. Базовая архитектура и принципы работы. Особенности алгоритма обратного распространения ошибки во времени и вытекающие ограничения на размер сети. Ячейки долгой краткосрочной памяти (LSTM) и управляемые рекуррентные блоки (GRU) для сохранения памяти сети об отдаленных событиях в прошлом.</p> <p>Ограниченная машина Больцмана. Особенности архитектуры, кодирование распределения вероятности входных данных при помощи параметров сети. Процесс обучения в случае входных векторов с бинарными коэффициентами.</p> <p>Автоэнкодеры. Латентное представление данных. Вариационные автоэнкодеры. Предварительная оптимизация модели при помощи ограниченной машины Больцмана.</p>
<p><b>P5</b></p>	<p>Анализ физических систем при помощи алгоритмов машинного обучения</p>	<p>Восстановление уравнений движения частицы по имеющимся данным о ее траектории. Особенности выбора системы отсчета и метода оптимизации.</p> <p>Анализ Броуновского движения. Восстановление коэффициентов классической и аномальной диффузии из данных о траекториях частиц.</p> <p>Построение магнитных фазовых диаграмм в модели Изинга, Гейзенберга, а также при наличии анизотропного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Определение фазовых переходов на основе анализа ошибки нейронной сети.</p> <p>Классификация динамических процессов, вызванных пикосекундными импульсами электромагнитного поля. Моделирование спиновой динамики системы.</p> <p>Использование автоэнкодеров для получения основной информации о системе, предсказание поведения при изменении параметров.</p> <p>Восстановление волновой функции квантовых спиновых гамильтонианов.</p>

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

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

### 1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## **2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Нейросетевые методы исследования физических систем**

#### **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)
2. Белозерова, Г. И.; Нечеткая логика и нейронные сети : учебное пособие. 1. ; Липецкий государственный педагогический университет имени П.П. Семенова-Тян-Шанского, Липецк; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=576909> (Электронное издание)

#### **Печатные издания**

1. Круглов, В. В., Борисов, В. В.; Искусственные нейронные сети. Теория и практика; Горячая линия : Телеком, Москва; 2001 (3 экз.)
2. Круглов, В. В., Борисов, В. В.; Искусственные нейронные сети. Теория и практика; Горячая линия : Телеком, Москва; 2001 (3 экз.)
3. Головкин, В. А., Галушкин, А. И.; Нейронные сети: обучение, организация и применение : Учеб. пособие для студентов по направлению подгот. бакалавров и магистров "Прикладная математика и физика".; ИПРЖР, Москва; 2001 (2 экз.)
4. Усков, А. А., Кузьмин, А. В.; Интеллектуальные технологии управления. Искусственные нейронные сети и нечеткая логика; Горячая линия - Телеком, Москва; 2004 (2 экз.)
5. Тархов, Д. А., Галушкин, А. И.; Нейронные сети. Модели и алгоритмы; Радиотехника, Москва; 2005 (7 экз.)
6. Хайкин, Хайкин С., Куссуль, Н. Н., Шелестов, А. Ю.; Нейронные сети. Полный курс; Вильямс, Москва ; Санкт-Петербург ; Киев; 2006 (7 экз.)

#### **Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы**

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

<http://www.mielt.ru/dir/cat15/subj172.html>

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/>).

#### **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**

<http://www.iop.org>

www.elibrary.ru

www.nature.com

archive.neicon.ru

### 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### Нейросетевые методы исследования физических систем

#### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Matlab+Simulink
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Matlab R2008a

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Высокопроизводительные вычисления**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 6 от 11.02.2022 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

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

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

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

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

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

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Архитектуры многопроцессорных систем	Обзор существующих архитектур многопроцессорных систем.
P2	Методы разработки параллельных вычислений на многопроцессорных системах с общей памятью	Особенности распараллеливания алгоритмов на системах с общей памятью. Основы стандарта OpenMP распараллеливания алгоритмов.
P3	Методы разработки параллельных вычислений на многопроцессорных системах с общей памятью	Особенности распараллеливания алгоритмов на системах с общей памятью. Основы стандарта OpenMP распараллеливания алгоритмов.
P4	Параллельные вычисления на кластерных многопроцессорных системах и коммуникационная среда MPI	Особенности распараллеливания алгоритмов на системах с распределенной памятью. Коммуникационная среда MPI, как основа распараллеливания алгоритмов на кластерных системах. Гибридный под-ход MPI+OpenMP в распараллеливании алгоритмов
P5	Использование графических процессоров для высокопроизводительных вычислений	Использование библиотек Nvidia CUDA и OpenCL для решения задач моделирования процессов и свойств современных материалов.

<b>Р6</b>	Использование нативных методов реализации многопоточных вычислений	Использование подключаемых библиотек и встроенных функций в некоторых научных и околонаучных языках программирования
<b>Р7</b>	Паттерны проектирования параллельных программ	Описание шаблонов, отработанных подходов к созданию устойчивого параллельного алгоритма, рассмотрение последовательности создания параллельного решения на основе существующих шаблонов и подходов

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Высокопроизводительные вычисления

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Гергель, В. П.; Теория и практика параллельных вычислений : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ)|Бином. Лаборатория знаний, Москва; 2007; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=233067> (Электронное издание)
2. Жуматий, С. А.; Вычислительное дело и кластерные системы: курс : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Москва; 2008; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=234002> (Электронное издание)
3. Воеводин, В. В.; Вычислительная математика и структура алгоритмов : курс лекций.; Национальный Открытый Университет «ИНТУИТ», Москва; 2016; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=578102> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Воеводин, В. В., Воеводин, В. В.; Параллельные вычисления : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению 510200 "Прикладная математика и информатика".; БХВ-Петербург, Санкт-Петербург; 2002 (5 экз.)
2. Немнюгин, Сергей А., С. А., Стесик, Ольга Л.; Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем; БХВ-Петербург, Санкт-Петербург; 2002 (2 экз.)
3. Голуб, Дж., Воеводин, В. В., Нечепуренко, Ю. М., Романов, А. Ю., Собянин, А. В., Тартышников, Е. Е.; Матричные вычисления; Мир, Москва; 1999 (2 экз.)
4. Вержбицкий, В. М.; Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения) : учеб. пособие для студентов мат. и инженер. специальностей вузов.; ОНИКС 21 век, Москва; 2005 (98 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

ArtSpb.com

www.ams.org

www.elibrary.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

[www.scopus.com](http://www.scopus.com)

[www.springer.com](http://www.springer.com)

[www.link.springer.com](http://www.link.springer.com)

[zbmath.org](http://zbmath.org)

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Высокопроизводительные вычисления

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 Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Mathematica10.2 Educational Network Increment Bundled List Price Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica10.2 Educational Network Increment Bundled List Price Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM