

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
1156285	Компьютерное моделирование

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Математика	Код ОП 1. 01.03.01/33.01
Направление подготовки 1. Математика	Код направления и уровня подготовки 1. 01.03.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Пьянзина Елена Сергеевна	кандидат физико- математических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра теоретической и математической физики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Компьютерное моделирование

1.1. Аннотация содержания модуля

Данный модуль рассматривает математические методы построения моделей, а также основу и методики проведения компьютерных экспериментов. Цель первой дисциплины модуля научить студентов использовать современные методы математического моделирования свойств дипольных магнитных жидкостей, овладеть оптимизационными методами функционала свободной энергии для расчета и прогнозирования кластерообразования в дипольных жидкостях. Второй курс направлен на изложение основных понятий компьютерного моделирования на примере моделирования физических систем. Данный курс предполагает обучение двум основным методам компьютерного моделирования метод молекулярной динамики и метод Монте Карло. В результате изучения данного курса студента ознакомятся с основными методами проведения компьютерного моделирования, их преимуществами и недостатками, с основными взаимодействиями в рассматриваемых системах, способами получения данных компьютерных экспериментов

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	Построение математических моделей	2
2	Компьютерные эксперименты	2
3	Проект по модулю "Компьютерное моделирование"	2
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

Компьютерные эксперименты	ПК-4 - Способен разрабатывать и реализовывать алгоритмы математических моделей на базе языков программирования и пакетов прикладных программ	<p>З-1 - Перечислить необходимые алгоритмы математического моделирования для задачи из профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Определять оптимальные методы для построения различных математических моделей, выделять необходимые языки программирования</p> <p>П-1 - Осуществить компиляцию алгоритмов для математических моделей на базе языков программирования и пакетов прикладных программ</p>
	ПК-6 - Способность использовать методы математического и алгоритмического моделирования при анализе управленческих задач в научнотехнической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний	<p>З-1 - Описывать современные методы математического и алгоритмического моделирования</p> <p>У-1 - Анализировать задачи в различных сферах деятельности с использованием математического и алгоритмического аппарата</p> <p>П-1 - Разрабатывать модели для управленческих задач в научно-технической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний</p>
Построение математических моделей	ПК-2 - Способен создавать и исследовать новые математические модели в естественных науках, промышленности и бизнесе, с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники	<p>З-1 - Определять необходимые методы для создания новых математических моделей с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники</p> <p>У-1 - Анализировать разработанные математические модели в естественных науках, промышленности и бизнесе</p> <p>П-1 - Осуществлять обоснованный выбор методов математического моделирования для различных областей, с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники</p>
	ПК-6 - Способность использовать методы математического и алгоритмического моделирования при анализе управленческих задач в	<p>З-1 - Описывать современные методы математического и алгоритмического моделирования</p> <p>У-1 - Анализировать задачи в различных сферах деятельности с использованием</p>

	<p>научнотехнической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний</p>	<p>математического и алгоритмического аппарата</p> <p>П-1 - Разрабатывать модели для управленческих задач в научно-технической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний</p>
<p>Проект по модулю "Компьютерное моделирование"</p>	<p>ПК-2 - Способен создавать и исследовать новые математические модели в естественных науках, промышленности и бизнесе, с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники</p>	<p>З-1 - Определять необходимые методы для создания новых математических моделей с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники</p> <p>У-1 - Анализировать разработанные математические модели в естественных науках, промышленности и бизнесе</p> <p>П-1 - Осуществлять обоснованный выбор методов математического моделирования для различных областей, с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники</p>
	<p>ПК-4 - Способен разрабатывать и реализовывать алгоритмы математических моделей на базе языков программирования и пакетов прикладных программ</p>	<p>З-1 - Перечислить необходимые алгоритмы математического моделирования для задачи из профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Определять оптимальные методы для построения различных математических моделей, выделять необходимые языки программирования</p> <p>П-1 - Осуществить компиляцию алгоритмов для математических моделей на базе языков программирования и пакетов прикладных программ</p>
	<p>ПК-6 - Способность использовать методы математического и алгоритмического моделирования при анализе управленческих задач в научнотехнической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний</p>	<p>З-1 - Описывать современные методы математического и алгоритмического моделирования</p> <p>У-1 - Анализировать задачи в различных сферах деятельности с использованием математического и алгоритмического аппарата</p> <p>П-1 - Разрабатывать модели для управленческих задач в научно-технической сфере, в экономике, бизнесе и гуманитарных областях знаний</p>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Построение математических моделей

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Иванов Алексей Олегович	д. ф.-м. н., профессор	профессор	кафедра теоретической и математической физики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 2 от 13.04.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Иванов Алексей Олегович, профессор, кафедры теоретической и математической физики**

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
КР/Т-01	Основные свойства дипольных (магнитных)	Магнитные жидкости: основные характеристики, магнитные свойства. Межчастичные взаимодействия: диполь-дипольное взаимодействие и зеемановское взаимодействие с внешним магнитным полем, стерическое взаимодействие защитных оболочек, ван-дер-ваальсово взаимодействие. Свободная энергия, статистическая сумма, конфигурационный интеграл.
КР/Т-02	Вириальное разложение	Лямбда-разложение конфигурационного интеграла. Понятие диаграммного ряда. Оценка топологических и комбинаторных свойств диаграмм. Суммирование диаграмм и кумулянтное разложение свободной энергии. Вириальный ряд и вириальные коэффициенты. Особенности дипольных жидкостей. Вириальное разложение в присутствии внешнего магнитного поля. Закон намагничивания Ланжевена и модель высокотемпературного приближения.
КР/Т-03	Метод корреляционных функций	Корреляционные функции. Метод возмущений для расчета диаграммного ряда. Одночастичная и парная корреляционные функции дипольной жидкости. Представление намагниченности через парную корреляционную функцию. Модифицированная теория среднего поля: намагниченность и восприимчивость. Анизотропия парной корреляционной функции магнитных жидкостей во внешнем поле.
КР/Т-04	Метод функционала свободной энергии	Проблемы расчета свободной энергии в системах кластеризующихся частиц. Применяющийся метод математического моделирования: функционал свободной

		энергии. Построение функционала, оптимизация по выбранной функции. Пример дипольной жидкости, частицы которой образуют цепочечные агрегаты. Кластерный анализ в модели стержнеобразных и гибких цепочек. Начальная восприимчивость магнитной жидкости с цепочечными агрегатами. Кольцеобразные агрегаты. Низкотемпературный структурный переход «цепочки кольца». Низкотемпературный максимум восприимчивости.
--	--	--

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	ПК-2 - Способен создавать и исследовать новые математические модели в естественных науках, промышленности и бизнесе, с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники	З-1 - Определять необходимые методы для создания новых математических моделей с учетом возможностей современных информационных технологий и программирования и компьютерной техники

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Построение математических моделей

Электронные ресурсы (издания)

1. Балеску, Р., Р.; Равновесная и неравновесная статистическая механика : учебное пособие.; Мир, Москва; 1978; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=495472> (Электронное издание)
2. Полуниин, В. М.; Акустические эффекты в магнитных жидкостях : монография.; Физматлит, Москва; 2008; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68407> (Электронное издание)
3. Полуниин, В. М.; Акустические свойства нанодисперсных магнитных жидкостей : монография.; Физматлит, Москва; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=468383> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Вшивков, С. А.; Самоорганизация, фазовые переходы и свойства анизотропных сред в магнитном и

механическом полях; Изд-во АМБ, Екатеринбург; 2011 (20 экз.)

2. Блум, Э. Я.; Магнитные жидкости; Зинатне, Рига; 1989 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

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.edu.ru/> - Федеральный портал. Российское образование.
- <http://study.urfu.ru> –портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ
- <http://lib.urfu.ru> - Зональная научная библиотека ФГАОУ ВО УрФУ
- <http://lib.urfu.ru/mod/resource/view.php?id=2320> - Списки рекомендованной литературы от ЗНБ
- <http://biblioclub.ru> - портал-библиотека электронных книг
- <http://lib.urfu.ru/course/view.php?id=81> - заказ литературы из электронного каталога

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Построение математических моделей

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 Свободное ПО: Mozilla Firefox
2	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

		<p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	Свободное ПО: Mozilla Firefox
3	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p>	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
4	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Свободное ПО: Mozilla Firefox

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Компьютерные эксперименты

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Новак Екатерина Владимировна	к. ф.-м. н, доцент	доцент	кафедра теоретической и математической физики
2	Пьянзина Елена Сергеевна	кандидат физико- математических наук, без ученого звания	Доцент	Кафедра теоретической и математической физики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 2 от 13.04.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Новак Екатерина Владимировна, доцент, кафедра теоретической и математической физики
- Пьянзина Елена Сергеевна, Доцент, Кафедра теоретической и математической физики

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
КР/Т-01	Введение в компьютерное моделирование	Что такое компьютерное моделирование. Зачем применяться компьютерное моделирование. Основные методы компьютерного моделирования.
КР/Т-02	Метод молекулярной динамики	Основные потенциалы взаимодействий. Использование периодических граничных условий. Уравнения движения, уравнения Ланжевена. Алгоритм Верле. Скоростной алгоритм Верле. Радиальная функция распределения.
КР/Т-03	Метод Монте-Карло	Алгоритм Метрополиса

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной	ПК-4 - Способен разрабатывать и реализовывать алгоритмы математических	З-1 - Перечислить необходимые алгоритмы математического моделирования

	ая	успешной профессиональной деятельности	моделей на базе языков программирования и пакетов прикладных программ	для задачи из профессиональной деятельности
--	----	--	---	---

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерные эксперименты

Электронные ресурсы (издания)

1. ; Метод Монте-Карло на графических процессорах : учебное пособие.; Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, Екатеринбург; 2016; <http://www.iprbookshop.ru/69634.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Ибрагимов, И. М.; Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие [для вузов]; Лань, Санкт-Петербург [и др.]; 2010 (4 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Daan Frenkel and Berend Smit. "Understanding Molecular Simulation" (Second Edition). Academic Press, San Diego, 2002. eBook ISBN:9780080519982, Hardcover ISBN: 9780122673511. <https://www.elsevier.com/books/understanding-molecular-simulation/frenkel/978-0-12-267351-1>

Избранные главы.

<http://ezproxy.urfu.ru:2055/search?authors=Daan%20Frenkel&show=25&sortBy=relevance&lastSelectedFacet=articleTypes&articleTypes=CH>

2. <https://espressomd.github.io/>

3. Phillpot, S. (1998). Library - The Art of Molecular Dynamics Simulation, Rapaport D.C., (Cambridge University Press, New York, 1997), ISBN0-521-44561-2, ISBN0-521-59942-3. MRS Bulletin, 23(7), 71-71. doi:10.1017/S0883769400029201

<https://ezproxy.urfu.ru:4262/10.1017/S0883769400029201>

4. Giersz, M. (1996). Monte-Carlo Simulations. Symposium - International Astronomical Union, 174, 101-110. doi:10.1017/S0074180900001431

<https://doi.org/10.1017/S0074180900001431>

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.edu.ru/> - Федеральный портал. Российское образование.
- <http://study.urfu.ru> –портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ
- <http://lib.urfu.ru> - Зональная научная библиотека ФГАОУ ВО УрФУ
- <http://lib.urfu.ru/mod/resource/view.php?id=2320>- Списки рекомендованной литературы от ЗНБ
- <http://biblioclub.ru> - портал-библиотека электронных книг
- <http://lib.urfu.ru/course/view.php?id=81> - заказ литературы из электронного каталога

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерные эксперименты

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	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Свободное ПО: Mozilla Firefox, ESPResSo 4.1.4 (https://espressomd.org/wordpress/download/), VMD 1.9.3 (https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD), ParaView 5.9.1 (https://www.paraview.org/download/)
2	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Свободное ПО: Mozilla Firefox, ESPResSo 4.1.4 (https://espressomd.org/wordpress/download/), VMD 1.9.3 (https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD)

		<p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>nt/Download/download.cgi?PackageName=VMD), ParaView 5.9.1 (https://www.paraview.org/download/)</p>
3	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Свободное ПО: Mozilla Firefox, ESPResSo 4.1.4 (https://espressomd.org/wordpress/download/), VMD 1.9.3 (https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD), ParaView 5.9.1 (https://www.paraview.org/download/)</p>
4	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Свободное ПО: Mozilla Firefox, ESPResSo 4.1.4 (https://espressomd.org/wordpress/download/), VMD 1.9.3 (https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD), ParaView 5.9.1 (https://www.paraview.org/download/)</p>