

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
1153962	Моделирование физических систем

Екатеринбург

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

Программа модуля составлена авторами:

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

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Моделирование физических систем

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает в себя две дисциплины: «Моделирование электронной структуры твердых тел», «Нейросетевые методы исследования физических систем» и Проект по модулю. 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. В рамках проекта по модулю каждый студент закрепляет полученные знания в ходе разработки законченного программного продукта.

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	Проект по модулю Моделирование физических систем	3
2	Моделирование электронной структуры твердых тел	5
3	Нейросетевые методы исследования физических систем	4
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

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
<p>Моделирование электронной структуры твердых тел</p>	<p>УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде</p>	<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 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>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с</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,</p>

<p>использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>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-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>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</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>

	разработки, научно-исследовательскую, измерительно-аналитическую и технологическую аппаратуру (в соответствии с избранным направлением прикладных математики и физики)	<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>
Нейросетевые методы исследования физических систем	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>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</p>

		<p>экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</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 IT-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>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 экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p>

	<p>ПК-3 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-конструкторских разработок</p>	<p>З-1 - Сделать обзор характеристик научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации</p> <p>З-2 - Изложить порядок оформления научно-технической документации и заявок на приобретение приборов, материалов, другого научного оборудования</p> <p>У-1 - Выбирать методы и средства проведения исследований и разработок с учетом специфики поставленной задачи</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p>
<p>Проект по модулю Моделирование физических систем</p>	<p>УК-1 - Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, в том числе в цифровой среде</p>	<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 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-2 - Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание процессов управления проектом, планирования ресурсов, критерии оценки 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>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>
	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</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> <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-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>З-2 - Соотносить правила проведения профессиональных дискуссий с их характером, и демонстрировать понимание особенностей научных дискуссий</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>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</p>

		<p>соответствии с правилами и нормами письма на русском и английском языках</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>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-3 - Сделать обзор методов и средств проектирования программного обеспечения</p> <p>У-1 - Использовать типовые решения и шаблоны разработки программного обеспечения</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p>
	<p>ПК-3 - Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и опытно-</p>	<p>З-1 - Сделать обзор характеристик научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации</p> <p>У-1 - Выбирать методы и средства проведения исследований и разработок с учетом специфики поставленной задачи</p>

	конструкторских разработок	П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ
--	----------------------------	---

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Моделирование электронной структуры
твёрдых тел

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 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	Энергетические зоны электронов. 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

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

Моделирование электронной структуры твердых тел

Электронные ресурсы (издания)

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

Печатные издания

- Ландау, Л. Д., Пятаковский, 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.)
- Изюмов, Ю. А.; Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала; НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Москва; 2006 (1 экз.)
- Харрисон, У. А., Уолтер А., Ипатова, И. П., Китаев, Ю. Э., Алферов, Ж. И.; Т. 1 : в 2 томах.; Мир, Москва; 1983 (19 экз.)
- Соболев, В. В.; Электронная структура твердых тел в области фундаментального края поглощения [Т. 2]. Кристаллы группы II-VI; Институт компьютерных исследований, Москва; 2012 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

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

<http://fizteh.org/> - Официальный сайт физико-технического факультета.

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

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

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

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 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	Лабораторные занятия	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational VASP 5.2 Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

		Доска аудиторная Периферийное устройство	
--	--	---	--

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Нейросетевые методы исследования
физических систем

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

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

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 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 обуче-ния, основные типы решаемых задач и способы настройки параметров. Предварительная обработка данных. Стандартизация и алгоритмы семплирова-ния.
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.

		<p>Методы ближайших соседей. Определение ближайших соседей при помощи перебора и построения деревьев. Область применения данных алгоритмов и их ограничения. Метод K-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 K-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</p>

		<p>обучения и момент. Определение параметров оптимизационной процедуры на основе перекрестной проверки.</p> <p>Сверочная 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>P5</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>

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

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; <http://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. Медведев, В. С., Потемкин, В. Г.; Нейронные сети. Matlab 6; ДИАЛОГ-МИФИ, Москва; 2002 (2 экз.)
3. Головкин, В. А., Галушкин, А. И.; Нейронные сети: обучение, организация и применение : Учеб. пособие для студентов по направлению подгот. бакалавров и магистров "Прикладные 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

1. Edmund C. Stoner. "Collective Electron Ferromagnetism". In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 165.922 (1938), с. 372-414. ISSN: 00804630. URL: <http://www.jstor.org/stable/97057>.
2. C. Lanczos. "An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators". In: J. Res. Nat'l Bur. Std. 45 (1950), с. 255-282. URL: <http://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/045/>
3. J. Hubbard. "Electron Correlations in Narrow Energy Bands". In: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 276.1365 (1963), с. 238. DOI: 10.1098/rspa.1963.0204. URL: <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/276/1365/238>.

4. Geoffrey E. Hinton. "Training Products of Experts by Minimizing Contrastive Divergence". In: *Neural Computation* 14.8 (2002), c. 1771-1800. DOI: 10.1162/089976602760128018. URL: <https://doi.org/10.1162/089976602760128018>.
5. John Duchi, Elad Hazan and Yoram Singer. "Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization". In: *Journal of Machine Learning Research* 12.61 (2011), c. 2121-2159. URL: <http://jmlr.org/papers/v12/duchi11a.html>.
6. Niklas Romming et al., "Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions". In: *Science* 341.6146 (2013), c. 636-639. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.1240573. eprint: <https://science.sciencemag.org/content/341/6146/636.full.pdf>. URL: <https://science.sciencemag.org/content/341/6146/636>.
7. Lorenzo Cevolani, Giuseppe Carleo and Laurent Sanchez-Palencia. "Protected quasilocality in quantum systems with long-range interactions". In: *Phys. Rev. A* 92 (2015), 041603. DOI: 10.1103/PhysRevA.92.041603. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.041603>.
8. Kota Ido, Takahiro Ohgoe and Masatoshi Imada. "Time-dependent manyvariable variational Monte Carlo method for nonequilibrium strongly correlated electron systems". In: *Phys. Rev. B* 92 (2015), 245106. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.245106. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.245106>.
9. B. Blaß and H. Rieger. "Test of quantum thermalization in the two-dimensional transverse-field Ising model". In: *Sci. Rep.* 6 (2016), 38185. URL: <https://doi.org/10.1038/srep38185>.
10. Giuseppe Carleo and Matthias Troyer. "Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks". In: *Science* 355 (2017), c. 602-606. DOI: 10.1126/science.aag2302. URL: <https://science.sciencemag.org/content/355/6325/602>.
11. Diederik P. Kingma and Jimmy Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization (2017). arXiv: 1412.6980
12. Darya Medvedeva et al., "Exact diagonalization solver for extended dynamical mean-field theory". In: *Phys. Rev. B* 96 (2017), 235149. DOI: 10.1103/PhysRevB.96.235149. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.235149>.
13. Thibaut Perol, Michael Gharbi and Marine Denolle. "Convolutional neural network for earthquake detection and location". In: *Science Advances* 4.2 (2018). DOI: 10.1126/sciadv.1700578. EPRINT: <https://advances.sciencemag.org/content/4/2/e1700578.full.pdf>. URL: <https://advances.sciencemag.org/content/4/2/e1700578>.
14. Hiroki Saito and Masaya Kato. "Machine Learning Technique to Find Quantum Many-Body Ground States of Bosons on a Lattice". In: *J. Phys. Soc. Jpn.* 87.1 (2018), 014001. DOI: 10.7566/JPSJ.87.014001. URL: <https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.014001>.
15. I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov and V. V. Mazurenko. "Profile approach for recognition of three-dimensional magnetic structures". In: *Phys. Rev. B* 99 (2019), 024430. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.024430. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.024430>.
16. Oleg M Sotnikov and Vladimir V Mazurenko. "Neural network agent playing spin Hamiltonian games on a quantum computer". In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 53.13 (2020), 135303. DOI: 10.1088/1751-8121/ab73ad. URL: <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab73ad>.
17. Supplementary Materials of *Science* 355, 602-606 (2017).
18. Павел Нестеров. Ограниченная машина Больцмана как основа глубоких нейронных сетей. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=eSPgqo4XzrI>.
19. Павел Нестеров. Онлайн-лекция по ограниченной машине Больцмана. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=sYtHNYxw-W4>.

20. Самые популярные топологии искусственных нейронных сетей.
<https://www.asimovinstitute.org/the-neural-network-zoo-2016/>.

URL:

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. Государственная публичная научно-техническая библиотека. Режим доступа: <http://www.gpntb.ru>
2. Список библиотек, доступных в Интернет и входящих в проект «Либнет». Режим доступа: <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>
5. Библиотека нормативно-технической литературы. Режим доступа: <http://www.tehлит.ru>
6. Библиотека В. Г. Белинского. Режим доступа: <http://book.uraic.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. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лабораторные занятия	Рабочее место преподавателя Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM
2	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Mathematica 6.0.1 Educational Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

		Подключение к сети Интернет	
--	--	-----------------------------	--