

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт информационных технологий и интеллектуальных систем



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
_____ Турилова Е.А.
"___" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Физика. Дополнительные главы

Направление подготовки: 09.03.04 - Программная инженерия

Профиль подготовки: Разработка цифровых продуктов (с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий)

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): доцент, к.н. Галимзянов Б.Н. (кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов, Отделение физики), bulatgnmail@gmail.com

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-4	Владение навыками моделирования, анализа и использования формальных методов конструирования программного обеспечения, способность формализовать предметную область программного проекта и разработать спецификации для компонентов программного продукта

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- современные методы моделирования физических процессов и оценки их свойств;
- теоретические основы методов моделирования молекулярной/атомарной динамики;
- основы высокопроизводительных вычислительных систем, работа с суперкомпьютерами и вычислительными кластерами.

Должен уметь:

- пользоваться программными средами для моделирования свойств материалов
- оценивать время- и ресурсозатратность различных методов моделирования
- делать выводы о свойствах материалов на основе результатов моделирования
- использовать полученные навыки на практике

Должен владеть:

- навыками оптимизации в проектной деятельности
- навыками разработки проектов с использованием современных информационных технологий
- методами современных информационных систем в области моделирования процессов

Должен демонстрировать способность и готовность:

Владение навыками анализа и использования формальных методов конструирования программного обеспечения для моделирования физических процессов и оценки свойств материалов

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.06.04 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 09.03.04 "Программная инженерия (Разработка цифровых продуктов (с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий))" и относится к дисциплинам по выбору части ОПОП ВО, формируемой участниками образовательных отношений.

Осваивается на 4 курсе в 7 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных(ые) единиц(ы) на 180 часа(ов).

Контактная работа - 72 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 0 часа(ов), лабораторные работы - 72 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 108 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет с оценкой в 7 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе.	7	0	0	0	0	8	4	12
2.	Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации компьютерных расчетов.	7	0	0	0	0	8	4	12
3.	Тема 3. Современные методы моделирования физических процессов.	7	0	0	0	0	8	4	14
4.	Тема 4. Основы моделирования молекулярной динамики. Программирование и моделирование процессов.	7	0	0	0	0	10	6	14
5.	Тема 5. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство на основе результатов моделирования.	7	0	0	0	0	10	4	14
6.	Тема 6. Моделирование физических процессов с применением вычислительных пакетов.	7	0	0	0	0	8	4	14
7.	Тема 7. Параллельные расчеты и оптимизация процесса моделирования.	7	0	0	0	0	10	4	14
8.	Тема 8. Анализ, визуализация и описание результатов. Работа с современными приложениями по интерпретации результатов моделирования.	7	0	0	0	0	10	6	14
	Итого		0	0	0	0	72	36	108

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Введение. Роль моделирования в современном технологическом процессе.

Роль моделирования в современном технологическом процессе синтеза структур. История и этапы развития компьютерных технологий и компьютерного моделирования. Достижения современной науки. История развития компьютеров и электронных устройств. Языки программирования и их развитие. Преимущества и недостатки компьютерного моделирования. Основные возможности и отличие от традиционного эксперимента.

Тема 2. Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации компьютерных расчетов.

Высокопроизводительные расчеты. Аппаратная и программная компоненты. Методы организации. Методы проведения высокопроизводительных расчетов. Принципы передачи и обработки информации между сервером и клиентом. Основные этапы проведения высокопроизводительных расчетов. Основные принципы работы на суперкомпьютерах и вычислительных кластерах. Расчет времени моделирования и объема затрачиваемых ресурсов. Оптимизация расчетов.

Тема 3. Современные методы моделирования физических процессов.

Основные методы компьютерного моделирования и область их применения. Моделирование динамики атомов и молекул. Методы получения информации о межатомных взаимодействиях. Пространственно-временные масштабы моделирования и выбор оптимальных параметров. Методы классической молекулярной динамики, Монте-Карло, квантовохимические расчеты, крупнозернистое моделирование, метод конечных элементов.

Тема 4. Основы моделирования молекулярной динамики. Программирование и моделирование процессов.

Метод молекулярной динамики. Предсказание и расчет физических и механических свойств материалов. Моделирование динамики атомов и молекул. Основные этапы моделирования: теоретические основы, уравнения движения, интегрирование уравнений движения, краевые условия. Метод молекулярной динамики в дизайне новых материалов. Методы конструирования эффективных потенциалов межатомного/межмолекулярного взаимодействия на основе экспериментальных данных о структуре системы. Основы программирования и разработки модулей моделирования молекулярной динамики.

Тема 5. Методы поиска материалов с заданными свойствами. Поиск количественных соотношений структура-свойство на основе результатов моделирования.

Методы поиска материалов с заданными свойствами. Анализ конфигурационных данных моделирования. Методы обработки конфигурационных данных. Методы кластерного и структурного анализа результатов моделирования. Определение ориентационного и трансляционного порядка в системе. Расчет парной корреляционной функции. Поиск количественных соотношений структура-свойство.

Тема 6. Моделирование физических процессов с применением вычислительных пакетов.

Работа с вычислительным пакетом для моделирования молекулярной динамики lammps. Работа со script-файлом, запуск и отладка расчетов. Работа с входными параметрами и выходными файлами. Работа с единицами измерения, статистическими ансамблями и фиксами. Работа с Manual файлом программы lammps, Проведение расчетов.

Тема 7. Параллельные расчеты и оптимизация процесса моделирования.

Параллельные расчеты в пакете lammps mpi. Оценка точность расчетов при выполнении моделирования. Ресурсоемкость. Минимизация ошибок и оптимизация расчетов. Выбор критериев оценки точности. Определение абсолютной и относительной погрешностей расчетов. Использование приближений. Рассмотрение различных методик повышения точности расчетов.

Тема 8. Анализ, визуализация и описание результатов. Работа с современными приложениями по интерпретации результатов моделирования.

Предсказание физико-механических свойств материалов на основе данных моделирования. Транспортные характеристики. Расчет энергии взаимодействия атомов/молекул. Визуализация результатов. Анализ структуры и физических свойств сплошных и пористых материалов. Работа с приложением OVITO, изучение интерфейса.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;

- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модуля).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Lammps для моделирования - <https://github.com/lammps/lammps>

База данных по свойствам материалов Materials Project - <https://next-gen.materialsproject.org/>

Среда визуализации результатов моделирования OVITO - <https://www.ovito.org/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лабораторные работы	При подготовке к лабораторным занятиям, обучающимся необходимо повторить пройденный материал, воспользовавшись конспектами лекций, а также основной и дополнительной литературой. Для получения дополнительной информации также можно воспользоваться Интернет-ресурсами. При подготовке к практическим занятиям, обучающимся необходимо повторить пройденный материал, воспользовавшись конспектами лекций, а также основной и дополнительной литературой. Для получения дополнительной информации также можно воспользоваться Интернет-ресурсами.
самостоятельная работа	При подготовке к самостоятельной работе, обучающимся необходимо повторить пройденный материал, воспользовавшись конспектами лекций, а также основной и дополнительной литературой. Для получения дополнительной информации также можно воспользоваться Интернет-ресурсами, а также ссылками, которые указаны в рабочем плане.
зачет с оценкой	При подготовке к зачету необходимо изучить все пройденные темы и изучить дополнительную литературу. Необходимо пользоваться Интернет-ресурсами. По каждой пройденной теме рекомендуется подготовить краткий конспект для лучшего усвоения материала. Зачетный билет будет содержать два теоретических вопроса

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 09.03.04 "Программная инженерия" и профилю подготовки "Разработка цифровых продуктов (с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий)".

*Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.06.04 Физика. Дополнительные главы*

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 09.03.04 - Программная инженерия

Профиль подготовки: Разработка цифровых продуктов (с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий)

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Основная литература:

Бухтояров, Л. Д. Компьютерное моделирование в профессиональной деятельности. Лабораторный практикум : учебное пособие для вузов / Л. Д. Бухтояров. - Санкт-Петербург : Лань, 2025. - 44 с. - ISBN 978-5-507-51441-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/447248> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Золкин, А. Л. Математическое моделирование и анализ данных : учебное пособие для вузов / А. Л. Золкин, М. В. Сартаков. - Санкт-Петербург : Лань, 2025. - 128 с. - ISBN 978-5-507-51616-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/455660> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Митяков, Е. С. Искусственный интеллект и машинное обучение : учебное пособие для вузов / Е. С. Митяков, А. Г. Шмелева, А. И. Ладынин. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2026. - 252 с. - ISBN 978-5-507-51198-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/507451> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

Бухтояров, Л. Д. Компьютерное моделирование в профессиональной деятельности. Лабораторный практикум : учебное пособие для вузов / Л. Д. Бухтояров. - Санкт-Петербург : Лань, 2025. - 44 с. - ISBN 978-5-507-51441-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/447248> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Золкин, А. Л. Математическое моделирование и анализ данных : учебное пособие для вузов / А. Л. Золкин, М. В. Сартаков. - Санкт-Петербург : Лань, 2025. - 128 с. - ISBN 978-5-507-51616-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/455660> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Митяков, Е. С. Искусственный интеллект и машинное обучение : учебное пособие для вузов / Е. С. Митяков, А. Г. Шмелева, А. И. Ладынин. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2026. - 252 с. - ISBN 978-5-507-51198-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/507451> (дата обращения: 28.10.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ДВ.06.04 Физика. Дополнительные главы

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 09.03.04 - Программная инженерия

Профиль подготовки: Разработка цифровых продуктов (с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий)

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.