МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ КОРАБЛЕБУДУВАННЯ
імені адмірала Макарова
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
КОМП'ЮТЕРНИХ НАУК ТА УПРАВЛІННЯ ПРОЕКТАМИ

Код РПНД

ЗАТВЕРДЖЕНО
Проректор з науково-
педагогічної роботи
Слободян С.О.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Program of the Discipline

СУЧАСНІ МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНИХ СИМУЛЯЦІЙ
Modern methods of computer simulations

рівень вищої освіти: другий (магістерський)

тип дисципліни: вибіркова

мова(и) викладання: українська

Миколаїв – 2024

Робоча програма навчальної дисципліни "Сучасні методи комп'ютерних симуляцій".

22 січня 2024 року. –17 с.

Розробники:
М. В. Ушкац – д.ф.-м.н., професор кафедри інформаційних управляючих систем та технологій

Проєкт робочої програми навчальної дисципліни "Сучасні методи комп'ютерних симуляцій" розглянуто на засіданні кафедри інформаційних управляючих систем та технологій.
Протокол № 6 від «23» січня 2024 р.
Завідувач кафедри_____/І. Л. Михелєв/

Проєкт робочої програми навчальної дисципліни "Сучасні методи комп'ютерних симуляцій" розглянуто Науково-методичною комісією Навчально-наукового інституту комп'ютерних наук та управління проєктами.
Протокол № 6 від «23» січня 2024 р.

Голова _____ /Т. А. Фаріонова/

Проєкт робочої програми навчальної дисципліни "Сучасні методи комп'ютерних симуляцій" погоджено з навчальним відділом.
Начальник відділу_____/А. В. Лабарткава/

Робоча програма навчальної дисципліни "Сучасні методи комп'ютерних симуляцій" затверджена Навчально-методичною радою НУК.
Протокол №___ від «___»_____2024 р.

Голова НМР НУК_____/С. О. Слободян/

© Ушкац М.В.
© НУК, 2024

Зміст

Вступ 4
1. Опис навчальної дисципліни 6
2. Мета вивчення навчальної дисципліни 7
3. Передумови для вивчення дисципліни 7
4. Очікувані результати навчання 7
5. Програма навчальної дисципліни 8
6. Методи навчання, засоби діагностики результатів навчання та методи їх демонстрування 12
7. Форми поточного та підсумкового контролю 13
8. Критерії оцінювання результатів навчання 15
9. Засоби навчання 15
10. Рекомендовані джерела інформації 16

Вступ

Аннотація

Дисципліна "Сучасні методи комп’ютерних симуляцій" призначена: ознайомити студентів з теоретичним базисом сучасних методів комп’ютерного моделювання складних систем та процесів в різноманітних областях техніки, економіки, соціального життя, IT-технологій тощо; розвинути логічне й алгоритмічне мислення; сформувати навички практичного використання сучасних програмних та апаратних засобів в різного роду комп’ютерних симуляціях.

Курс дисципліни "Сучасні методи комп’ютерних симуляцій" складається з двох модулів відповідно до змісту навчального матеріалу.

Перший змістовий модуль присвячений теоретичним основам моделювання складних систем, класифікації видів моделювання, їх особливостям та порівняльним характеристикам, загальним положенням формалізації складних процесів, а також основним положенням теорії похибок.

У другому змістовому модулі розглядаються головні сучасні програмні та апаратні засоби комп’ютерного моделювання, методи генерації псевдовипадкових послідовностей, існуючі технології багатопоточних обчислень, конкретні приклади моделювання методами Метрополіс Монте-Карло та молекулярної динаміки.

Ключові слова: комп’ютерне моделювання, числові симуляції, складні системи та процеси, теорія похибок, технологія багатопоточних обчислень.

Abstract

The discipline "Modern methods of computer simulations" is intended for the following: to acquaint the students with the existing theoretical background of modern computer-modeling methods to study complex systems and processes in various fields of technology, economics, social life, IT-sphere, etc.; to develop logical and algorithmic thinking; to form the skills of practical applications of modern software and hardware in various computer simulations.

The course "Modern methods of computer simulations" consists of two modules according to the content of the study material.

The first content module is devoted to the theoretical background for the mathematical modeling of complex systems, classifications of model types, their features and comparative characteristics, general issues on the formalization of complex processes, as well as the basics of the measurement error theory.

The second content module is devoted to the modern software and hardware tools of computer modeling, methods to generate pseudo-random sequences, existing technologies of multithread computing, and specific examples of modeling by using Metropolis Monte Carlo and molecular dynamics techniques.

Key words: computer modeling, numerical simulations, complex systems and processes, measurement error theory, multithread computing technology.

1. Опис навчальної дисципліни

<table>
<tr><td rowspan="2">Найменування показників</td><td rowspan="2">Галузь знань, спеціальність (освітня програма), освітній рівень</td><td colspan="2">Характеристика навчальної дисципліни</td></tr>
<tr><td>Денна форма навчання</td><td>Заочна форма навчання</td></tr>
<tr><td>Кількість кредитів – 5</td><td></td><td colspan="2">Вибіркова</td></tr>
<tr><td>Модулів – 1</td><td rowspan="5"></td><td colspan="2">Рік підготовки:</td></tr>
<tr><td>Змістових модулів – 2</td><td rowspan="2">1-й</td><td rowspan="2">1-й</td></tr>
<tr><td>Електроний адрес РПНД на сайті Університету:</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Загальна кількість годин – 150</td><td colspan="2">Семестри</td></tr>
<tr><td>1-й</td><td>1-й</td></tr>
<tr><td rowspan="12">Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4; самостійної роботи студента – 6.</td><td rowspan="12">Освітній рівень: другий (магістерський)</td><td colspan="2">Лекції</td></tr>
<tr><td>30 год</td><td>10 год</td></tr>
<tr><td colspan="2">Практичні заняття</td></tr>
<tr><td>30 год</td><td>10 год</td></tr>
<tr><td colspan="2">Самостійна робота</td></tr>
<tr><td>90 год</td><td>130 год</td></tr>
<tr><td colspan="2">Індивідуальні завдання</td></tr>
<tr><td>–</td><td>–</td></tr>
<tr><td colspan="2">Вид контролю: залік</td></tr>
<tr><td colspan="2">Форма контролю: комбінована (письмовий контроль, тестовий контроль)</td></tr>
</table>

2. Мета вивчення навчальної дисципліни

Метою вивчення навчальної дисципліни "Сучасні методи комп’ютерних симуляцій" є ознайомити студентів з теоретичним базисом сучасних методів комп’ютерного моделювання складних систем та процесів, сформувати навички практичного використання сучасних програмних та апаратних засобів в комп’ютерних симуляціях, навчити їх на практиці застосовувати зазначені методи в різних областях техніки, економіки, соціального життя, ІТ - технологій тощо та сформувати у студентів наступні **професійні здатності**:

- Здатність розробляти та аналізувати математичні моделі природних, техногенних, економічних і соціальних об’єктів та процесів.
- Здатність формувати нові гіпотези та дослідницькі задачі в області системного аналізу та прийняття рішень, вибирати належні напрями для їх застосування.
- Здатність проектувати архітектуру інтелектуальних інформаційних систем.
- Здатність застосовувати методи кількісного і якісного оцінювання ризиків, розроблення алгоритмів управління ризиками в складних системах різної природи.

3. Передумови для вивчення дисципліни

Передумови для вивчення дисципліни відсутні.

4. Очікувані результати навчання

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент отримає наступні знання та вміння, що забезпечать зазначені у меті професійні здатності:

Знання та **вміння** застосовувати на практиці методи системного аналізу, методи математичного та інформаційного моделювання для побудови та дослідження моделей об’єктів і процесів інформатизації.

Знання та **вміння** застосовувати методи еволюційного моделювання та

генетичні методи оптимізації, методи індуктивного моделювання та математичний апарат нечіткої логіки, нейронних мереж, теорії ігор та розподіленого штучного інтелекту тощо.

Знання та **вміння** впроваджувати системи високонавантажених обчислень та обробки даних в задачах системного аналізу і управління, та системах підтримки прийняття рішень.

Знання моделей, методів та алгоритмів прийняття рішень в умовах конфлікту, нечіткої інформації, невизначеності і ризику.

5. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Сучасні методи комп'ютерних симуляцій

Змістовий модуль 1. Теоретичні основи моделювання складних систем.

Тема 1. Моделювання як метод пізнання.

Класифікація видів моделювання, їх особливості та порівняльні характеристики. Загальні положення формалізації складної системи.

[1] p. 12-45; [2] стор. 7-25.

Тема 2. Детерміновані моделі.

Неперервно-детерміновані моделі на основі диференціальних рівнянь. Метод Ейлера. Варіаційний підхід, задача про мінімум функціоналу. Метод скінченних елементів (сіток), скінченно-різницеві рівняння. Дискретно-детерміновані моделі на основі скінченних автоматів.

[2] стор. 106-111; [3] стор. 9-66, 260-329.

Тема 3. Стохастичні моделі.

Неперервно-стохастичні та дискретно-стохастичні моделі. Динамічні системи з дискретним втручанням випадку. Моделювання випадкових подій та простих ланцюгів Маркова. Методи Монте-Карло, Метрополіс Монте-Карло.

[2] стор. 27-56, 94-106; [4] p. 23-58.

Тема 4. Елементи теорії похибок.

Основні поняття теорії похибок. Похибки комп'ютерних розрахунків. Оцінка похибки скінченно-різницевих схем. Оцінка похибки в методах Монте-Карло.

[5] стор. 98-210.

Змістовий модуль 2. Сучасні програмні та апаратні засоби моделювання. Приклади моделювання.

Тема 5. Генерація псевдовипадкових чисел.

Лінійний конгруентний генератор та його модифікації. Вихор Мерсена. Період генератора, його відповідність розподілу Гауса.

[2] стор. 111-124.

Тема 6. Технології багатопоточних обчислень.

Використання сучасних графічних процесорів для прискорення обчислень, їх переваги та недоліки. Платформа CUDA. Технологія Compute Shader бібліотеки DirectX.

[11] sec. 2, 3.

Тема 7. Молекулярна динаміка.

Сучасні методи молекулярної динаміки. Скінченно-різницева схема алгоритму Верле. Моделювання міжмолекулярних сил певним потенціалом взаємодії. Визначення термодинамічних параметрів системи з великим числом молекул.

[4] p. 63-105.

Тема 8. Задача Ізінга.

Поняття фазового простору. Статистична сума системи та її конфігураційна складова. Визначення статистичної суми феромагнетику методом Метрополіс Монте-Карло. Дослідження намагнічування як фазового переходу.

[4] p. 111-135, 167-199.

Тематичний план навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	**Кількість годин**											
	денна форма						**Заочна форма**					
	усього	**у тому числі**					**усього**	**у тому числі**				
		л	**лаб**	**п**	**ср**	**інд**		**л**	**лаб**	**п**	**ср**	**інд**
1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**	**11**	**12**	**13**
Змістовий модуль 1. Теоретичні основи моделювання складних систем												
Тема 1. Моделювання як метод пізнання. Класифікація видів моделювання, їх особливості та порівняльні характеристики. Загальні	**16**	4	0	2	10	0	**16**	2	0	1	13	0

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						Заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	лаб	п	ср	інд		л	лаб	п	ср	інд
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
положення формалізації складної системи												
Тема 2. Детерміновані моделі. Неперервно-детерміновані моделі на основі диференціальних рівнянь. Метод Ейлера. Варіаційний підхід, задача про мінімум функціоналу. Метод скінченних елементів (сіток), скінченно-різницеві рівняння. Дискретно-детерміновані моделі на основі скінченних автоматів.	**20**	4	0	4	12	0	**20**	2	0	1	17	0
Тема 3. Стохастичні моделі. Неперервно-стохастичні та дискретно-стохастичні моделі. Динамічні системи з дискретним втручанням випадку. Моделювання випадкових подій та простих ланцюгів Маркова. Методи Монте-Карло, Метрополіс Монте-Карло.	**20**	4	0	4	12	0	**20**	1	0	2	17	0
Тема 4. Елементи теорії похибок. Основні поняття теорії похибок. Похибки комп'ютерних розрахунків. Оцінка похибки скінченно-різницевих схем. Оцінка похибки в методах Монте-Карло.	**19**	4	0	4	11	0	**19**	1	0	2	16	0
Разом за ЗМ 1	**75**	**16**	**0**	**14**	**45**	0	**75**	**6**	**0**	**6**	**63**	0
Змістовий модуль 2. Сучасні програмні та апаратні засоби моделювання. Приклади моделювання												
Тема 5. Генерація псевдовипадкових чисел. Лінійний конгруентний генератор та його модифікації. Вихор Мерсена. Період генератора, його	**19**	4	0	4	11	0	**19**	1	0	1	17	0

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						Заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	лаб	п	ср	інд		л	лаб	п	ср	інд
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
відповідність розподілу Гауса.												
Тема 6. Технології багатопоточних обчислень. Використання сучасних графічних процесорів для прискорення обчислень, їх переваги та недоліки. Платформа CUDA. Технологія Compute Shader бібліотеки DirectX.	**19**	4	0	4	11	0	**19**	1	0	1	17	0
Тема 7. Молекулярна динаміка. Сучасні методи молекулярної динаміки. Скінченно-різницева схема алгоритму Верле. Моделювання міжмолекулярних сил певним потенціалом взаємодії. Визначення термодинамічних параметрів системи з великим числом молекул.	**19**	4	0	4	11	0	**19**	1	0	1	17	0
Тема 8. Задача Ізінга. Поняття фазового простору. Статистична сума системи та її конфігураційна складова. Визначення статистичної суми феромагнетику методом Метрополіс Монте-Карло. Дослідження намагнічування як фазового переходу.	**18**	2	0	4	12	0	**18**	1	0	1	16	0
Разом за ЗМ 2	**75**	**14**	**0**	**16**	**45**	**0**	**75**	**4**	**0**	**4**	**67**	**0**
Усього годин	**150**	**30**	**0**	**30**	**90**	**0**	**150**	**10**	**0**	**10**	**130**	**0**

Теми лабораторних занять

Лабораторні заняття непередбачені навчальним планом.

Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		денна форма	заочна форма
Змістовий модуль 1. Теоретичні основи моделювання складних систем			
1.	Перевірка навичок створення зручного інтерфейсу користувача для комп'ютерних обчислень	2	1
2.	Числові методи розв'язку диференціальних рівнянь	4	1
3.	Інтегрування методом Метрополіс Монте-Карло	4	2
4. .	Статистична обробка числового масиву даних	4	2
	Разом за ЗМ 1	14	6
Змістовий модуль 2. Сучасні програмні та апаратні засоби моделювання. Приклади моделювання			
5.	Визначення характеристик генератора псевдовипадкових чисел Taus88	4	1
6.	Створення SQL шейдера для багатопоточного обчислення інтеграла методом Гауса	4	1
7.	Моделювання системи *N* частинок з потенціалом взаємодії Ленард-Джонса алгоритмом Верле	4	1
8.	Дослідження намагнічування двовимірного феромагнетику методом Метрополіс Монте-Карло	4	1
	Разом за ЗМ 2	16	4
	Разом	**30**	**10**

Самостійна робота

Розподіл часу самостійної роботи

№ з/п	Вид роботи	Кількість годин	
		денна форма	заочна форма
1	Підготовка до лекцій	15	15
2	Підготовка до практичних робіт	40	60
3	Підготовка до поточних модульних контрольних робот	35	55
	Разом	**90**	**130**

6. Методи навчання, засоби діагностики результатів навчання та методи їх демонстрування

Набуття здобувачами компетенцій забезпечується через засвоєння навчального матеріалу у вигляді лекційних, практичних занять, самостійної роботи студентів та контрольних тестових робіт програмованого типу.

Основними **методами навчання** з дисципліни є:

1. **Пояснювально-ілюстративний метод**, за допомогою повідомлення та засвоєння інформації на лекційних та практичних заняттях словесними й наочними засобами.

2. **Проблемний метод**, коли на практичних заняттях утворюються пошукові ситуації, розвивається активність, самостійність, творчі здібності здобувачів освіти.

Як наочний матеріал на лекціях застосовуються мультимедійні слайди та лекційні демонстрації.

Для зручної та ефективної організації навчального процесу, зроблено ClassRoom з навчальної дисципліни, де розташовані завдання до практичних робіт та супроводжувальні матеріали. Доступ до класу надається на першому практичному занятті.

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з дисципліни "Сучасні методи комп’ютерних симуляцій" є:

– звіти з виконання практичної роботи та/або презентації результатів виконаних завдань та досліджень (письмовий контроль);

– поточні модульні контрольні роботи у формі тестування (тестовий контроль);

– студентські презентації та виступи, тези доповідей, статті відповідної до дисципліни тематики на наукових заходах (письмовий контроль).

7. Форми поточного та підсумкового контролю

Досягнення студента оцінюються за 100-бальною системою Університету.

Підсумкова оцінка навчального курсу включає в себе суму оцінок поточного контролю. У кожного компонента своя частка в загальній системі оцінок.

Поточний контроль проводиться на кожному практичному занятті та за результатами виконання завдань самостійної роботи. Він передбачає оцінювання теоретичної підготовки здобувачів вищої освіти із зазначеної теми (у тому числі, самостійно опрацьованого матеріалу) під час роботи на практичних заняттях.

Зарахування кредитів навчального курсу можливо тільки після досягнення результатів, запланованих РПНД, що виражається в одній з позитивних оцінок, передбачених чинним законодавством.

Форми контролю результатів навчальної діяльності студентів та їх оцінювання

Поточний контроль виконання етапів комплексної практичної роботи (письмовий контроль)

Виконання кожного з етапів комплексної практичної роботи має супровожуватися звітом та/або презентацією результатів виконаних завдань та досліджень, допускаються для зарахування етапу (етапів) студентські презентації та виступи, тези доповідей, статті відповідної до дисципліни тематики на наукових заходах.

Оцінювання практичних робіт Бал	**Критерії оцінювання**
5	Робота виконана у встановлений термін. Виконана самостійно, чітко сформульовані цілі, завдання та гіпотеза досліджень. Застосовувалися коректні методи обробки отриманих результатів. У висновках проведена коректна інтерпретація результатів.
4	Робота виконана у встановлений термін. Студент виконує практичну роботу згідно з інструкцією, іноді після консультації викладача; описує спостереження; в цілому правильно складає звіт та робить висновки.
3	Робота виконана з порушенням встановлених термінів. Студент виконує практичну роботу згідно з інструкцією, іноді після консультації викладача; описує спостереження; складає звіт, що містить неточності у висновках та помилки.
2	Робота виконана з порушенням встановлених термінів. Студент виконує практичну згідно з інструкцією; складений звіт містить неточності у висновках та помилки.
1	Робота виконана з порушенням встановлених термінів. Студент виконує практичну під керівництвом викладача; складений звіт містить неточності у висновках та помилки.
0	Робота не виконувалася.

Максимальна оцінка студента за даний компонент програми 25 балів (5 етапів комплексної практичної роботи по 5 балів).

Поточний модульний контроль (тестовий контроль)

Правильних відповідей,%	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10	5
Бал	30	28	24	22	18	16	12	10	6	4	1

По завершенні змістовного модуля здійснюється поточний модульний контроль – тестування.

Форма контролю	**Максимальна кількість балів**	
	Денна форма	**Заочна форма**
Звіти з виконання практичної роботи (письмовий контроль)	8 х 5 балів = 40 балів	8 х 5 балів = 40 балів
Поточний модульний контроль (тестовий контроль)	2 х 30 балів = 60 балів	2 х 30 балів = 60 балів
Всього	**100**	**100**

8. Критерії оцінювання результатів навчання

	Денна форма		**Заочна форма**	
	Вид роботи	**Бали**	**Вид роботи**	**Бали**
ЗМ 1	Практична робота № 1	5	Практична робота № 1	5
	Практична робота № 2	5	Практична робота № 2	5
	Практична робота № 3	5	Практична робота № 3	5
	Практична робота № 4	5	Практична робота № 4	5
	Поточний модульний контроль	30	Поточний модульний контроль	30
ЗМ 2	Практична робота № 5	5	Практична робота № 5	5
	Практична робота № 6	5	Практична робота № 6	5
	Практична робота № 7	5	Практична робота № 7	5
	Практична робота № 8	5	Практична робота № 8	5
	Поточний модульний контроль	30	Поточний модульний контроль	30

9. Засоби навчання

Технічні засоби навчання: мультимедійний проектор, персональні комп’ютери з підключенням до мережі Інтернет.

Комп’ютерні засоби навчання: Google For Education, Wiki, Visual Studio.

10. Рекомендовані джерела інформації

Основна література

1. Duran Juan M., Arnold Eckhart (eds.) Computer Simulations and the Changing Face of Scientific Experimentation. Cambridge: Cambridge Scholars Publishing, 2013. – 260 p.
2. Коробова М.В. Основи математичного моделювання економічних, екологічних та соціальних процесів / М.В. Коробо- ва, І.М. Ляшенко, А.М. Столяр. - Тернопіль: "Навчальна книга - Богдан", 2016. - 304 с.
3. Стеценко І.В. Моделювання систем: навч. посіб. / І.В. Стеценко; М-во освіти и науки України, Черк. держ. технол. ун-т. – Черкаси: видавництво „Маклаут”, 2011. – 502с.
4. D. Frenkel, B. Smit (eds.) Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications 1st ed. (Academic Press, Inc., Orlando, 1996).
5. Дорожовець М. та ін. Основи метрології та вимірювальної техніки: У 2 т. / М. Дорожовець, В. Мотало, Б. Стадник, В. Василюк, Р. Борек, А. Ковальчик; За ред.. Б. Стадника. — Львів: Видавництво Національного університету «Львівська політехніка», 2005. — Т. 1. Основи метрології. — 532 с.

Допоміжна література

6. Томашевський В.М. Моделювання систем. Підручнік / В.М. Томашевський.- К.: Видавнича група BHV, 2015. - 352с.
7. Meredith D. Fundamentals of Management Science / D. Meredith, J. Turban. – Lakewood : Irwin, 1989. – 914 p.

Інформаційні ресурси

9. https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html – керівництво по роботі з платформою CUDA.

Розробник:
професор кафедри інформаційних
управляючих систем та технологій,
д.ф.-м.н. М. В. Ушкац