

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
2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1142911	Компьютерный дизайн новых материалов

Екатеринбург, 2020

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Материалы микро- и наносистемной техники	Код ОП 1. 28.04.01/33.01
Направление подготовки 1. Нанотехнологии и микросистемная техника	Код направления и уровня подготовки 1. 28.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Болячкин Антон Сергеевич	кандидат физико- математических наук	доцент	кафедра магнетизма и магнитных наноматериалов

Согласовано:

Управление образовательных программ



Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ

Компьютерный дизайн новых материалов

1.1. Аннотация содержания модуля

В модуль входит курс «Компьютерный дизайн новых материалов». Курс посвящен методам сбора и анализа данных, которые могут быть использованы для эффективного поиска новых материалов и оптимизации их свойств. В результате его прохождения слушатель ознакомится с современными средствами автоматического анализа информации на основе методов машинного обучения. Полученные знания будут подкреплены подробным рассмотрением основных этапов процесса поиска нового материала с желаемым набором свойств на конкретном примере.

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	Компьютерный дизайн новых материалов	3
ИТОГО по модулю:		3

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Методы математического моделирования
Постреквизиты и корреквизиты модуля	Решение прикладных задач в специализированных пакетах программ

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)
Компьютерный дизайн новых материалов	ОПК 1. Способен формулировать и решать научно-исследовательские, технические, организационно-экономические и комплексные задачи, применяя фундаментальные знания	<p>РО 1-3 ОПК 1 Соотносить проблемную область с соответствующей областью фундаментальных и инженерных наук.</p> <p>РО 2-3 ОПК 1 Привести примеры терминологии, принципов, методологических подходов и законов фундаментальных и инженерных наук, применимых для формулирования и решения задач проблемной области знания.</p> <p>РО 1-У ОПК 1 Использовать для формулирования и решения задач проблемной области терминологию, основные принципы, методологические подходы и законы фундаментальных и инженерных наук.</p> <p>РО 1-У ОПК 1 Критически оценить возможные способы решения задач проблемной области, используя знания фундаментальных и инженерных наук.</p> <p>РО 1-В ОПК 1 Работая в команде, разрабатывать варианты формулирования и решения научно-исследовательских, технических, организационно-экономических и комплексных задач, применяя</p>

		знания фундаментальных и общеинженерных наук. РО1-ЛК ОПК1 Проявлять лидерские качества и умения командной работы.
	ОПК-2. Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа.	РО 1-3 ОПК 2 Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности. РО 2-3 ОПК 2 Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности. РО 1-У ОПК 2 Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа. РО 2-У ОПК 2 Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности. РО 1-В ОПК 2 Решать самостоятельно сформулированные практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ. РО1-ЛК ОПК2 Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели.
	ПК-3. Способен разрабатывать физические и математические модели, проводить компьютерное моделирование исследуемых физических процессов в области нанотехнологии и микросистемной техники	Знать структуру и свойства материалов, методы построения моделей исследуемых процессов, явлений и объектов. Применять теоретические знания и алгоритмы для решения задач, составлять математические модели, применять методы математического моделирования при исследовании физических процессов. Собирать, анализировать и обобщать данные, владеть методами изучения, анализа и математического описания физических процессов.

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в форме:

Очная

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Компьютерный дизайн новых
материалов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Болячкин Антон Сергеевич	кандидат физико- математических наук	доцент	кафедра магнетизма и магнитных наноматериалов

Рекомендовано учебно-методическим советом института естественных наук и математики

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология;

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Введение в дисциплину	Основные понятия и обозначения. Основы языка программирования Python, библиотеки для работы с данными (NumPy, Pandas, Scikit-Learn).
2	Основы машинного обучения	Логические методы классификации. Решающие деревья и их композиции. Метрические и линейные методы классификации. Метод опорных векторов и логистическая регрессия. Метрики качества классификации. Линейная регрессия. Понижение размерности, метод главных компонент. Композиции алгоритмов, градиентный бустинг. Нейронные сети. Кластеризация и визуализация. Частичное обучение.
3	Основы микромагнитного моделирования	Базовые понятия: намагниченность, магнитная восприимчивость, доменная структура и др. Основные вклады в свободную энергию магнетиков: энергия обменного взаимодействия, энергия магнитокристаллической анизотропии, магнитостатическая энергия, магнитоупругая энергия, энергия Зеемана. Внутреннее эффективное поле. Микромагнитные уравнения Брауна, их линеаризация. Численные решения микромагнитных уравнений для двумерных и трехмерных распределений намагниченности; моделирование статических и динамических процессов намагничивания. Расчет микромагнитных задач с применением программ <code>muMax³</code> и <code>OOMMF</code> .
4	Машинное обучение в прикладных задачах	Прикладные задачи анализа данных: постановки и методы решения. Машинное обучение в физике и материаловедении. Открытые базы данных.

1.3. Программа дисциплины реализуется:

на государственном языке Российской Федерации (русский).

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

1. Шалев-Шварц, Ш. Идеи машинного обучения : учебное пособие / Ш. Шалев-Шварц, Бен-Давид Ш. ; перевод с английского А. А. Слинкина. — Москва : ДМК Пресс, 2019. — 436 с. — Режим доступа: ЭБС Лань.

2. Флах, П. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных / П. Флах. — Москва : ДМК Пресс, 2015. — 400 с. — Режим доступа: ЭБС Лань.
3. Рашка, С. Python и машинное обучение: крайне необходимое пособие по новейшей предсказательной аналитике, обязательное для более глубокого понимания методологии машинного обучения : руководство / С. Рашка ; перевод с английского А. В. Логунова. — Москва : ДМК Пресс, 2017. — 418 с. — Режим доступа: ЭБС Лань.
4. Вьюгин, В. В. Математические основы машинного обучения и прогнозирования : учебное пособие / В. В. Вьюгин. — Москва : МЦНМО, 2014. — 304 с. — Режим доступа: ЭБС Лань.

Печатные издания

1. Дюк, В. Data Mining : Учеб. курс / В. Дюк, А. Самойленко. — СПб.; М.; Харьков; Минск : Питер, 2001. — 368 с. [1 экз.].
2. Нейронные сети: История развития теории : Учеб. пособие для студентов вузов по направлению подгот. бакалавров и магистров "Прикладные математика и физика" / Под общ. ред. А.И. Галушкина, Я.З. Цыпкина. — М. : ИПРЖР, 2001. — 840 с. [4 экз.].
3. Тархов, Дмитрий Альбертович. Нейронные сети. Модели и алгоритмы / Д. А. Тархов. — М. : Радиотехника, 2005. — 256 с. [7 экз.].
4. Хайкин, Саймон. Нейронные сети. Полный курс / Саймон Хайкин ; [пер. с англ. Н. Н. Кукуль, А. Ю. Шелестова под ред. Н. Н. Кукуль]. — 2-е изд. — Москва ; Санкт-Петербург ; Киев : Вильямс, 2006. — 1104 с. [7 экз.].
5. Харламов, Александр Александрович. Нейросетевая технология представления и обработки информации (естественное представление знаний : [монография] / А. А. Харламов. — Москва : Радиотехника, 2006. — 88 с. [8 экз.].
6. Галушкин, Александр Иванович. Теория нейронных сетей : Учеб. пособия для вузов. Кн. 1 / А. И. Галушкин. — М. : Радиотехника, 2000. — 416 с. [3 экз.].

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. American Institute of Physics <http://scitation.aip.org/>
2. American Physical Society <https://journals.aps.org/about>
3. Applied Science & Technology Source EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com>
4. INSPEC EBSCO publishing <http://search.ebscohost.com/>
5. Institute of Physics (IOP) <http://iopscience.iop.org/>

Материалы для лиц с ОВЗ

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

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. Зональная научная библиотека УрФУ. URL: <http://lib.urfu.ru/>.
2. Российская государственная библиотека. URL: <http://www.rsl.ru>.
3. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. URL: <http://www.gpntb.ru>.

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции; Семинарские занятия; Консультации; Самостоятельная работа студентов	Аудитория для проведения занятий лекционного, семинарского типа, текущей и промежуточной аттестации, оснащённая мультимедийным оборудованием	Microsoft Windows 7 по программе Desktop Education ALNG LicSAPk MVL B Faculty EES. Договор 43-12/1864- 2018 от 05.12.2018 Браузер Google Chrome – свободное ПО; Браузер Mozilla Firefox – свободное ПО; MS Office 2007/2010 - лицензия № 42095516, срок действия – б/с Spyder IDE – свободное ПО