

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
« 29 » _____ 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. Управление исследованиями и разработками	Код ОП 1. 27.04.05/33.01
Направление подготовки 1. Инноватика	Код направления и уровня подготовки 1. 27.04.05

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:

Учебный отдел



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	
Постреквизиты и корреквизиты модуля	

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Компьютерный дизайн новых материалов	ОПК-1 - Способен формулировать и решать научно-исследовательские, технические, организационно-экономические и комплексные задачи, применяя фундаментальные знания	З-1 - Соотносить проблемную область с соответствующей областью фундаментальных и инженерных наук З-2 - Привести примеры терминологии, принципов, методологических подходов и законов фундаментальных и инженерных наук, применимых для формулирования и решения задач проблемной области знания У-1 - Использовать для формулирования и решения задач проблемной области терминологию, основные принципы, методологические подходы и законы фундаментальных и инженерных наук У-2 - Критически оценить возможные способы решения задач проблемной области, используя знания фундаментальных и инженерных наук П-1 - Работая в команде, разрабатывать варианты формулирования и решения научно-исследовательских, технических, организационно-экономических и комплексных задач, применяя знания фундаментальных и инженерных наук Д-1 - 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	<p>З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа, применимых для формализации и решения задач профессиональной деятельности</p> <p>З-2 - Характеризовать сферы применения и возможности пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>У-1 - Самостоятельно сформулировать задачу области профессиональной деятельности, решение которой требует использования методов моделирования и математического анализа</p> <p>У-2 - Использовать методы моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>П-1 - Решать самостоятельно сформулированные практические задачи, относящиеся к профессиональной деятельности методами моделирования и математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	ПК-3 - Способен использовать методы и инструменты изучения рынков для маркетинговых исследований в заданных отраслевых сегментах	<p>З-1 - Применять методы оптимизации, основные методы прогнозирования, специализированное программное обеспечение для сбора и анализа информации</p> <p>У-1 - Анализировать данные по оптимизации и эффективности проектов в области высоких технологий</p> <p>П-1 - Осуществлять реализацию задач в зоне своей ответственности с учетом имеющихся ресурсов и ограничений, действующих правовых норм</p> <p>П-2 - Оценивать конкурентоспособность и коммерческий потенциал в проектах в области высоких технологий</p>

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
P1	Введение в дисциплину	Основные понятия и обозначения. Основы языка программирования Python, библиотеки для работы с данными (NumPy, Pandas, Scikit-Learn).
P2	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.
P3	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 OOMMF.
P4	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.

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.
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.
3. Тархов, Дмитрий Альбертович. Нейронные сети. Модели и алгоритмы / Д. А. Тархов .— М. : Радиотехника, 2005 .— 256 с.
4. Хайкин, Саймон. Нейронные сети. Полный курс / Саймон Хайкин ; [пер. с англ. Н. Н. Куссуль, А. Ю. Шелестова под ред. Н. Н. Куссуль] .— 2-е изд. — Москва ; Санкт-Петербург ; Киев : Вильямс, 2006 .— 1104 с.
5. Харламов, Александр Александрович. Нейросетевая технология представления и обработки информации (естественное представление знаний : [монография] / А. А. Харламов .— Москва : Радиотехника, 2006 .— 88 с.
6. Галушкин, Александр Иванович. Теория нейронных сетей : Учеб. пособия для вузов. Кн. 1 / А. И. Галушкин .— М. : Радиотехника, 2000 .— 416 с.

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	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции; Семинарские занятия; Консультации; Самостоятельная	Аудитория для проведения занятий лекционного, семинарского типа, текущей и промежуточной аттестации, оснащённая	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

	работа студентов	мультимедийным оборудованием	ПО; Браузер Mozilla Firefox – свободное ПО; MS Office 2007/2010 - лицензия № 42095516, срок действия – б/с Spyder IDE – свободное ПО
--	------------------	---------------------------------	---

**Приложение
к рабочей программе дисциплины**

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

**Примерные вопросы к зачету по дисциплине
«Компьютерный дизайн новых материалов»**

1. Основные понятия, задачи и область применения машинного обучения.
2. Логические методы классификации. Решающие деревья и их композиции.
3. Метрические и линейные методы классификации.
4. Метод опорных векторов и логистическая регрессия.
5. Метрики качества классификации.
6. Линейная регрессия. Понижение размерности, метод главных компонент.
7. Композиции алгоритмов, градиентный бустинг.
8. Нейронные сети.
9. Кластеризация и визуализация.
10. Частичное обучение.
11. Машинное обучение в физике и материаловедении. Примеры успешной реализации.
12. Основы микромагнитного моделирования. Вклады в свободную энергию магнетика.