

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
1154523	Компьютерный дизайн новых материалов

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Фундаментальная и прикладная физика	Код ОП 1. 03.05.02/33.01
Направление подготовки 1. Фундаментальная и прикладная физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.05.02

Программа модуля составлена авторами:

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

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Компьютерный дизайн новых материалов

1.1. Аннотация содержания модуля

Курс «Компьютерный дизайн новых материалов» 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	1. Компьютерные методы в физике 2. Современные программные продукты
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

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-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные	З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать

	реальные или модельные эксперименты	<p>необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</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-1 - Владеет методами экспериментальных и теоретических исследований и алгоритмического моделирования для решения профессиональных задач в области физики магнитных явлений, медицинской и теоретической физики, физики конденсированного состояния</p>	<p>З-2 - Классифицировать основные методы математического и алгоритмического моделирования, применимые для решения задач в области профессиональной деятельности</p> <p>У-2 - Определять оптимальные методы физического, математического и алгоритмического моделирования при решении задач в области профессиональной деятельности</p>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

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, без ученого звания	Доцент	магнетизма и магнитных наноматериалов

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 3 от 14.05.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Болячкин Антон Сергеевич, Доцент, магнетизма и магнитных наноматериалов**

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	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 mumax3 и OOMMF.

Р4	Машинное обучение в прикладных задачах	Прикладные задачи анализа данных: постановки и методы решения. Машинное обучение в физике и материаловедении. Открытые базы данных.
-----------	--	---

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология формирования уверенности и готовности к самостоятельной успешной профессиональной деятельности	ПК-1 - Владеет методами экспериментальных и теоретических исследований и алгоритмического моделирования для решения профессиональных задач в области физики магнитных явлений, медицинской и теоретической физики, физики конденсированного состояния	З-2 - Классифицировать основные методы математического и алгоритмического моделирования, применимые для решения задач в области профессиональной деятельности

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерный дизайн новых материалов

Электронные ресурсы (издания)

1. Сараев, П. В.; Методы машинного обучения : методические указания и задания к лабораторным работам по курсу.; Липецкий государственный технический университет, ЭБС АСВ, Липецк; 2017; <http://www.iprbookshop.ru/83183.html> (Электронное издание)
2. Сопов, Е. А.; Многокритериальные нейроэволюционные системы в задачах машинного обучения и человеко-машинного взаимодействия : монография.; Сибирский федеральный университет, Красноярск; 2019; <http://www.iprbookshop.ru/100054.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Дюк, В., Самойленко, А.; Data Mining : Учеб. курс.; Питер, СПб.; Москва; Харьков; Минск; 2001 (1 экз.)
2. Галушкин, А. И.; Нейронные сети: основы теории : [монография].; Горячая линия-Телеком, Москва; 2014 (1 экз.)

3. Галушкин, А. И.; Нейронные сети: основы теории; Горячая линия - Телеком, Москва; 2010 (2 экз.)
4. , Галушкин, А. И., Галушкин, А. И., Цыпкин, Я. З.; Нейронные сети: История развития теории : Учеб. пособие для студентов вузов по направлению подгот. бакалавров и магистров "Прикладные математика и физика".; ИПРЖР, Москва; 2001 (4 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.)
7. Харламов, А. А., Галушкин, А. И.; Нейросетевая технология представления и обработки информации (естественное представление знаний : [монография].; Радиотехника, Москва; 2006 (8 экз.)
8. Галушкин, А. И.; Теория нейронных сетей : Учеб. пособие для вузов.; ИПРЖР, Москва; 2000 (4 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Institute of Physics (IOP) <http://iopscience.iop.org/>
2. Электронная научная библиотека. <https://elibrary.ru>
3. Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>
4. Зональная научная библиотека УрФУ. URL: <http://lib.urfu.ru>

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. Российская государственная библиотека. URL: <http://www.rsl.ru>
2. Государственная публичная научно-техническая библиотека России. URL: <http://www.gpntb.ru>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерный дизайн новых материалов

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
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM

		соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет	Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES