

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

<b>Код модуля</b>	<b>Модуль</b>
1154783	Компьютерное моделирование наноматериалов

**Екатеринбург**

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Наноинженерия материалов и устройств	<b>Код ОП</b> 1. 28.04.02/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Наноинженерия	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 28.04.02

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Ремпель Андрей Андреевич	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	физических методов и приборов контроля качества

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Компьютерное моделирование наноматериалов

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль «Компьютерное моделирование наноматериалов» направлен на изучение основных принципов теоретического описания и прогнозирования свойств материалов с использованием атомистического компьютерного моделирования. В состав модуля включены две дисциплины: «Моделирование динамики атомов в наноматериалах» и «Машинное обучение в компьютерном моделировании наноматериалов», содержание которых позволит студентам овладеть основными методами атомистического моделирования и машинного обучения и научиться применять их для решения практических задач в области физики и химии конденсированного состояния. Особое внимание уделяется методам исследования атомной и электронной структуры наноматериалов с помощью современных компьютерных методов, включая машинное обучение.

## 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	Моделирование динамики атомов в наноматериалах	3
2	Машинное обучение в компьютерном моделировании наноматериалов	6
ИТОГО по модулю:		9

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Методы инженерии нанообъектов
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
Машинное обучение в компьютерном моделировании	ОПК-2 - Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи,	З-1 - Сделать обзор основных методов моделирования и математического анализа,

наноматериалов	относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа	<p>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>
	ОПК-3 - Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов	<p>З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>З-4 - Перечислить основные нормативные документы, регламентирующие оформление научно-технических отчетов и защиту прав интеллектуальной собственности</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p>

		<p>У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности</p> <p>У-3 - Оценивать оформление научно-технических отчетов, публикаций научных результатов, документов защиты интеллектуальной собственности на соответствие нормативным требованиям</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>П-2 - Оформить научно-технический отчет, публикацию научных результатов, документы защиты интеллектуальной собственности в соответствии с нормативными требованиями</p> <p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</p>
<p>Моделирование динамики атомов в наноматериалах</p>	<p>ОПК-2 - Способен самостоятельно ставить, формализовывать и решать задачи, относящиеся к профессиональной деятельности, используя методы моделирования и математического анализа</p>	<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</p>

		<p>математического анализа, в том числе с использованием пакетов прикладных программ</p> <p>Д-1 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов</p>	<p>З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>З-4 - Перечислить основные нормативные документы, регламентирующие оформление научно-технических отчетов и защиту прав интеллектуальной собственности</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности</p> <p>У-3 - Оценивать оформление научно-технических отчетов, публикаций научных результатов, документов защиты интеллектуальной собственности на соответствие нормативным требованиям</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>П-2 - Оформить научно-технический отчет, публикацию научных результатов, документы защиты интеллектуальной собственности в соответствии с нормативными требованиями</p>

		Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения
--	--	--

### **1.5. Форма обучения**

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Моделирование динамики атомов в**  
**наноматериалах**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Ремпель Андрей Андреевич	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	физических методов и приборов контроля качества

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 9 от 14.05.2021 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Ремпель Андрей Андреевич, Профессор, физических методов и приборов контроля качества

## 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
1	Компьютерное моделирование электронной структуры атомов	Использование пакета Wolfram Mathematica для расчета штарковского расщепления и волновых функций 3d- и 4f-атомов в кристаллах с различной точечной симметрией. Расчеты теплоемкости, парамагнитной восприимчивости.
2	Моделирование спектров магнитного резонанса	Основные понятия теории магнитного резонанса (ЭПР, ЯМР, ЯКР, эффект Мёссбауэра). Особенности моделирования спектров магнитного резонанса монокристаллов, поликристаллов, неоднородных спиновых структур. Примеры.
3	Метод Монте-Карло	Понятие о выборке, конфигурационном пространстве и вероятности конфигурации. Расчет средних методом Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Генерирование гауссовского распределения с помощью алгоритма Метрополиса. Условие детального баланса. Оценки ошибок в методе Монте-Карло. Двумерная модель Изинга. Численное моделирование фазового перехода ферромагнетик-парамагнетик. Расчет температурного поведения энергии основного состояния и намагниченности. Расходимость теплоемкости и восприимчивости в точке фазового перехода. Кластерные модификации метода Монте-Карло.
4	Моделирование спиновых и псевдоспиновых систем	Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерном магнетике. Моделирование структуры основного состояния и фазовых переходов в низкоразмерной псевдоспиновой системе типа

		локальных бозонов или ультра-холодных атомов в оптической решетке.
5	Моделирование зонной структуры кристаллов	Моделирование закона дисперсии и плотности состояний фононов и магнонов. Моделирование электронной зонной структуры. Стандартные пакеты для расчета электронной структуры

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Моделирование динамики атомов в наноматериалах

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Москвин, А. С.; Атомы в кристаллах : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/107024.html> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 1. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)

2. Гулд, Х., Полюдов, А. Н., Панченко, В. А.; Компьютерное моделирование в физике : в 2 ч. Ч. 2. ; Мир, Москва; 1990 (5 экз.)

3. , Овчинников, А. С., Сеницын, В. Е.; Компьютерное моделирование в физике : учебно-методическое пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2011 (20 экз.)

4. Кунин, С. Е., Стивен Е., Баркалов, А. Д., Явохин, А. Н., Матвеев, А. Н.; Вычислительная физика; Мир, Москва; 1992 (3 экз.)

5. Тарасевич, Ю. Ю.; Математическое и компьютерное моделирование : Вводный курс : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 030100 - информатика.; УРСС, Москва; 2003 (2 экз.)

6. Тарасевич, Ю. Ю.; Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности 030100 - Информатика.; УРСС, Москва; 2004 (1 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/>
6. Университетская библиотека онлайн: <http://biblioclub.ru>
7. Электронная научная библиотека <https://elibrary.ru>
8. 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

### Моделирование динамики атомов в наноматериалах

#### 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 соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не требуется
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Периферийное устройство Персональные компьютеры по количеству обучающихся	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

		<p>Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с санитарными правилами и нормами</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	
3	Консультации	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p>	<b>Не требуется</b>
4	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office Professional 2003 Win32 Russian CD-ROM</p> <p>Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p>
5	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p>	<b>Не требуется</b>

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Машинное обучение в компьютерном**  
**моделировании наноматериалов**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Ремпель Андрей Андреевич	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	физических методов и приборов контроля качества

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический**

Протокол № 9 от 14.05.2021 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Ремпель Андрей Андреевич, Профессор, физических методов и приборов контроля качества

## 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
1	Базовые понятия теории машинного обучения	Классификация алгоритмов машинного обучения, основные типы решаемых задач и способы настройки параметров. Предварительная обработка данных. Стандартизация и алгоритмы семплирования.
2	Алгоритмы, обучающиеся с учителем	Линейная регрессия, оптимизация параметров методом наименьших квадратов. Основная область применения алгоритма и ограничения. Модификация регрессии добавлением регуляризационного члена, накладывающего ограничения на коэффициенты. Полиномиальная регрессия, описание не-линейной динамики системы. Регрессия Хьюбера, учет выбросов и ошибок в данных. Классификация данных на основе логистической регрессии. Метод опорных векторов. Случаи линейной разделимости и не разделимости данных. Переход в спрямляющее пространство, ядро преобразования. Связь метода с простейшей нейронной сетью. Методы ближайших соседей. Определение ближайших соседей при помощи перебора и построения деревьев. Область применения данных алгоритмов и их ограничения. Метод K-ближайших соседей в задачах классификации и регрессии. Классификация на основе центроид. Переход от Евклидовой

		<p>метрики к более эффективной при помощи алгоритма Neighborhood Components Analysis.</p> <p>Деревья решений. Особенности построения деревьев для различного типа входных данных.</p> <p>Методы ансамблей. Случайный лес и классификация на основе голосования. Adaptive Boosting и Gradient Boosting алгоритмы, особенности их обучения и область применимости.</p>
3	Алгоритмы, обучающиеся без учителя	<p>Снижение размерности данных. Анализ главных компонент на основе диагонализации ковариационной матрицы и сингулярного разложения, простой итерационный алгоритм. Оценка доли сохраненной информации при переходе в новое пространство.</p> <p>Низкоразмерная визуализация данных при помощи алгоритма t-SNE, важные параметры метода и описание получаемых результатов. Расстояние Кульбака-Лейблера.</p> <p>Кластеризация данных. Алгоритм K-средних, особенности работы и обучения. Метод сдвига среднего, как модификация на случай неизвестного количества кластеров в данных. Алгоритмы, основанные на анализе плотности данных и не делающие предположение об изотропной структуре кластеров.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе сравнения полученных меток с исходными. Индекс Рэнда, взаимная информация, однородность, полнота и V-мера.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе анализа структуры данных. Коэффициент Силуэта, индекс Калински-Харабаса, индекс Дэвиса-Болдина.</p>
4	Нейронные сети	<p>Базовые понятия. Нейрон, синапс, функция активации, входные и выходные данные, функция потерь. Типы функций активации, советы по их использованию. Обзор существующих архитектур.</p> <p>Обзор исторически важных архитектур нейронных сетей. Перцептрон, особенности работы и аппаратная реализация. Алгоритм коррекции ошибки, теорема сходимости перцептрона. Обучение на примере логической функции XOR. Нейронная сеть Хопфилда, структура, особенности работы, обучение. Восстановление поврежденных образов. Предел памяти сети. Нейронная сеть Кохонена, примеры использования, геометрическая интерпретация.</p> <p>Нейронная сеть прямого распространения, предназначение и принципы работы. Алгоритм обратного распространения ошибки, стохастический градиентный спуск, скорость обучения и момент. Определение параметров оптимизационной процедуры на основе перекрестной проверки.</p>

		<p>Сверточная нейронная сеть. История исследования зрительной зоны головного мозга. Основные понятия: фильтр, карта признаков, рецептивное поле, свертка, подвыборка. Структура сети и принципы ее работы. Некоторые стандартны фильтры: определение границ, размытие, повышение резкости. Модификация метода обратного распространения ошибки.</p> <p>Рекуррентные нейронные сети. Базовая архитектура и принципы работы. Особенности алгоритма обратного распространения ошибки во времени и вытекающие ограничения на размер сети. Ячейки долгой краткосрочной памяти (LSTM) и управляемые рекуррентные блоки (GRU) для сохранения памяти сети об отдаленных событиях в прошлом.</p> <p>Ограниченная машина Больцмана. Особенности архитектуры, кодирование распределения вероятности входных данных при помощи параметров сети. Процесс обучения в случае входных векторов с бинарными коэффициентами.</p> <p>Автоэнкодеры. Латентное представление данных. Вариационные автоэнкодеры. Предварительная оптимизация модели при помощи ограниченной машины Больцмана.</p> <p>Тренировка нейронных сетей на основе обучения с подкреплением. Базовые алгоритмы и использование в теории игр.</p>
5	Анализ физических систем при помощи алгоритмов машинного обучения	<p>Частичное обучение с учителем. Алгоритмы автоматической маркировки данных обучающего набора на основе наличия небольшого числа образцов, класс которых изначально известен.</p> <p>Восстановление уравнений движения частицы по имеющимся данным о ее траектории. Особенности выбора системы отсчета и метода оптимизации.</p> <p>Построение магнитных фазовых диаграмм в модели Изинга, Гейзенберга, а также при наличии анизотропного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Определение фазовых переходов на основе анализа ошибки нейронной сети.</p> <p>Классификация динамических процессов, вызванных пикосекундными импульсами электромагнитного поля. Моделирование спиновой динамики системы.</p> <p>Использование автоэнкодеров для получения основной информации о системе, предсказание поведения при изменении параметров.</p> <p>Восстановление волновой функции квантовых спиновых гамильтонианов.</p> <p>Предсказание магнитных параметров соединения по кристаллографическим данным. Моделирование структуры материала, обладающего необходимыми параметрами.</p>

		<p>Нахождение атомных потенциалов и моделирование функционала электронной плотности. Определение энергии молекулярной атомизации.</p> <p>Моделирование логических функций на системе наночастиц золота. Особенности генетических алгоритмов оптимизации.</p>
--	--	--

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Машинное обучение в компьютерном моделировании наноматериалов

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Гладков, Л. А., Курейчик, В. М.; Генетические алгоритмы : учебник.; Физматлит, Москва; 2010; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68417> (Электронное издание)
2. Трахтенброт, Б. А.; Алгоритмы и машинное решение задач : научно-популярное издание.; Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва; 1957; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228179> (Электронное издание)
3. Гордиенко, А. Б.; Физика конденсированного состояния. Решение задач : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232487> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Ашкрофт, Н., Мермин, Н., Михайлов, А. С., Каганов, М. И.; Физика твердого тела Т. 1 / пер. с англ. А. С. Михайлова под ред. М. И. Каганова. ; Мир, Москва; 1979 (4 экз.)
2. Ашкрофт, Н., Кугель, К. И., Михайлов, А. С., Каганов, М. И.; Физика твердого тела: В 2 т. Т. 2. ; Мир, Москва; 1979 (33 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

scikit-learn <https://scikit-learn.org/stable/>

Keras <https://keras.io/>

#### 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**

Machine Learning: A Probabilistic Perspective (Adaptive Computation and Machine Learning Series) / Murphy, Kevin P. MIT Press. 2014

Encyclopedia of Machine Learning and Data Mining / Sammut. Springer. 2016

П. Флах. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases / Peter A. Flach; Tijl Bie; Nello Cristianini. Springer Berlin Heidelberg. 2012 10

An introduction to statistical learning: with applications in R / G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani. – New York: Springer, 2013. – 426 с.

Data Analysis, Machine Learning and Knowledge Discovery / Spiliopoulou, Myra; Janning, Ruth; Schmidt-Thieme, Lars; Gesellschaft für Klassifikation. Springer International Publishing. 2014

### **3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

#### **Машинное обучение в компьютерном моделировании наноматериалов**

#### **Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

Таблица 3.1

<b>№ п/п</b>	<b>Виды занятий</b>	<b>Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Перечень лицензионного программного обеспечения</b>
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Доска аудиторная	<b>Не требуется</b>
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов  Рабочее место преподавателя  Периферийное устройство  Персональные компьютеры по количеству обучающихся  Оборудование, соответствующее требованиям организации учебного процесса в соответствии с	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc  Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

		санитарными правилами и нормами Подключение к сети Интернет	
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	<b>Не требуется</b>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	<b>Не требуется</b>
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 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Office 365 EDUA1 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr Student EES