

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 30.09.2023 16:41:18

Уникальный программный ключ:

d7a26b9e8ca85e98ac3de2ab454b4659d961f749

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Компьютерные технологии в научных исследованиях

Закреплена за подразделением Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Направление подготовки 28.04.01 НАНОТЕХНОЛОГИИ И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА

Профиль Нанотехнологии, материалы микро- и наносистемной техники

Квалификация **Магистр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

в том числе:

аудиторные занятия 34

самостоятельная работа 74

Формы контроля в семестрах:
зачет с оценкой 2

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	2 (1.2)		Итого	
	УП	РП		
Неделя	18			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Практические	34	34	34	34
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	74	74	74	74
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):

-, *асс., Кубасов И.В.*

Рабочая программа

Компьютерные технологии в научных исследованиях

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Самостоятельно устанавливаемый образовательный стандарт высшего образования - магистратура Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» по направлению подготовки 28.04.01 НАНОТЕХНОЛОГИИ И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНИКА (приказ от 05.03.2020 г. № 95 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, 28.04.01-МНТМ-22-1.plx Нанотехнологии, материалы микро- и наносистемной техники, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, Нанотехнологии, материалы микро- и наносистемной техники, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра материаловедения полупроводников и диэлектриков

Протокол от 28.06.2021 г., №07/21

Руководитель подразделения Оганов А.Р.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цель – научить использовать регрессионные модели, сплайны и численное интегрирование для обработки результатов научных исследований.
1.2	Задачи дисциплины:
1.3	1. Научить работе с числами с плавающей точкой (в нотации согласно международному стандарту IEEE 754);
1.4	2. Научить использовать линейную и нелинейную регрессии для обработки результатов научных экспериментов и технологических процессов;
1.5	3. Научить использовать различные виды сплайнов для обработки результатов научных исследований;
1.6	4. Научить методам численного интегрирования.

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.О
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Актуальные проблемы современной электроники и нанoeлектроники	
2.1.2	Методы математического моделирования	
2.1.3	Микро- и наносистемы в технике и технологии	
2.1.4	Микропроцессорные и микроконтроллерные системы. Часть 1	
2.1.5	Современные методы диагностики и исследования наногетероструктур	
2.1.6	Специальные вопросы физики магнитных явлений в конденсированных средах. Часть 1	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Материалы и элементы спинтроники и спинволновой электроники	
2.2.2	Металлуглеродные композиционные наноматериалы	
2.2.3	Методы синтеза углеродных наноматериалов	
2.2.4	Молекулярно-пучковая и МОС-гидридная технологии	
2.2.5	Приборы и устройства магнитоэлектроники	
2.2.6	Процессы получения наночастиц и наноматериалов	
2.2.7	Электреты, мультиферроики, магнитоэлектрические явления	
2.2.8	Элионная технология в микро- и наноиндустрии	
2.2.9	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.10	Преддипломная практика	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-4: Способен выполнять исследования при решении инженерных и научно-технических задач, включая планирование и постановку сложного эксперимента, критическую оценку и интерпретацию результатов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения сложных задач в профессиональной области	
Знать:	
ОПК-4-31	Основные положения международного стандарта IEEE 754, описывающего компьютерное представление чисел с плавающей точкой
ОПК-4-32	Математический аппарат методов регрессионного анализа
ОПК-4-33	Способы анализа экспериментальных данных при помощи сплайнов
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий	
Знать:	
УК-1-32	Основные пакеты компьютерной алгебры, в том числе распространяемые бесплатно, их возможности и ограничения
УК-1-31	Математические основы численного интегрирования, применяемого при решении практических задач

ОПК-4: Способен выполнять исследования при решении инженерных и научно-технических задач, включая планирование и постановку сложного эксперимента, критическую оценку и интерпретацию результатов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения сложных задач в профессиональной области
Уметь:
ОПК-4-У2 Моделировать физические явления, результаты научных экспериментов и технологических процессов в области материаловедения полупроводников и диэлектриков в компьютерной среде GNU Octave
ОПК-4-У1 Применять числа с плавающей точкой в компьютерных расчетах и минимизировать вносимую использованием таких чисел ошибку вычислений
ОПК-4-У3 Использовать линейные и нелинейные регрессионные модели для анализа экспериментальных данных
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Уметь:
УК-1-У2 Работать со справочной литературой и другими информационными и нормативными материалами в области компьютерных и информационных технологий
УК-1-У1 Описывать экспериментальные данные при помощи слайнов; производить численное интегрирование различными методами
ОПК-4: Способен выполнять исследования при решении инженерных и научно-технических задач, включая планирование и постановку сложного эксперимента, критическую оценку и интерпретацию результатов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения сложных задач в профессиональной области
Владеть:
ОПК-4-В1 Навыками использования компьютерной среды GNU Octave для моделирования физических явлений, построения регрессионных моделей, слайнов и численного интегрирования наборов экспериментальных данных.
ОПК-4-В2 Навыками использования чисел с плавающей точкой в компьютерных вычислениях
УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий
Владеть:
УК-1-В2 Методами сбора экспериментальных данных с целью их корректной математической обработки
УК-1-В1 Алгоритмами численного интегрирования и дифференцирования, регрессионным анализом, навыками использования интерполяционных слайнов в описании полученных экспериментальных данных

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	Раздел 1. Международный стандарт чисел с плавающей точкой IEEE 754							
1.1	Понятие плавающей точки. Стандарты чисел с плавающей точкой и предпосылки для их появления. /Пр/	2	2	ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В2	Л1.1 Л1.2Л3.1		КМ1	
1.2	Международный стандарт чисел с плавающей точкой IEEE 754. Применение, ограничения и преимущества. /Пр/	2	2	ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В2	Л1.1 Л1.2		КМ1	
1.3	Анализ ошибок, возникающих при вычислениях с плавающей точкой. /Пр/	2	2	УК-1-У2 ОПК-4-31 ОПК-4-У1 ОПК-4-В2	Л1.1 Л1.2Л3.1		КМ1	

1.4	Изучение скорости выполнения компьютером операций с числами, представленными в форме с плавающей запятой. Количество операций с плавающей запятой в секунду (FLOPS). /Ср/	2	5	УК-1-В2 ОПК-4-31 ОПК-4-У2 ОПК-4-В2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2		КМ1	
Раздел 2. Сплайны								
2.1	Сплайны. Порядок, дефект и гладкость сплайна. /Пр/	2	2	УК-1-У2 УК-1-В1 УК-1-В2 ОПК-4-33 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4		КМ1	
2.2	Многочлен Лагранжа /Пр/	2	2	УК-1-У2 УК-1-В1 УК-1-В2 ОПК-4-33 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.3Л2.4		КМ1	
2.3	Квадратичный и кубический сплайн дефекта 1 /Пр/	2	2	УК-1-У2 УК-1-В1 УК-1-В2 ОПК-4-33 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.3Л2.4		КМ1	
2.4	Самостоятельная работа на нахождение функции по имеющемуся дискретному набору экспериментальных данных и нахождение промежуточных значений кусочно-квадратичным и кусочно-кубическим сплайнами дефекта 1. /Ср/	2	20	УК-1-У2 УК-1-В1 УК-1-В2 ОПК-4-33 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Э1			Р2
2.5	Самостоятельная работа на нахождение функции по имеющемуся дискретному набору экспериментальных данных и нахождение промежуточных значений кусочно-постоянной, кусочно-линейной, кусочно-квадратичной и кусочно-кубической интерполяциями. /Ср/	2	20	ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Э1			Р3
Раздел 3. Линейная и нелинейная регрессия								
3.1	Понятия аппроксимации, регрессии, интерполяции, сплайна. Линейная регрессия в двумерном пространстве. Метод наименьших квадратов /Пр/	2	2	ОПК-4-32 ОПК-4-33 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.3 Л1.4Л2.4		КМ1	Р1
3.2	Линейная регрессия в трехмерном и n-мерном пространстве. Матричная форма записи задачи линейной регрессии. /Пр/	2	4	УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-32 ОПК-4-У3	Л1.1 Л1.4Л2.4		КМ1	Р1
3.3	Линеаризуемые и нелинеаризуемые регрессионные модели. Нелинейная регрессия. Использование метода Ньютона при решении регрессионных задач. /Пр/	2	2	ОПК-4-32 ОПК-4-У3	Л1.1 Л1.4Л2.4		КМ1	

3.4	Алгоритмы Ньютона-Гаусса и Левенберга-Марквардта /Пр/	2	2	ОПК-4-32 ОПК-4-У3	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.4		КМ1	
3.5	Линейный регрессионный анализ в среде GNU Octave /Пр/	2	2	ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Э1		КМ1	
3.6	Нелинейный регрессионный анализ в среде GNU Octave /Пр/	2	2	ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Э1		КМ1	
3.7	Построение многочлена Лагранжа в среде GNU Octave /Пр/	2	2	ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Э1		КМ1	
3.8	Домашнее задание. Построение регрессионной зависимости в приближении линейной модели на основе имеющегося дискретного набора экспериментальных данных. /Ср/	2	24	УК-1-У2 УК-1-В2 ОПК-4-32	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.2 Э1			Р1
Раздел 4. Численное интегрирование								
4.1	Методы численного интегрирования /Пр/	2	4	УК-1-32 УК-1-В1 ОПК-4-У2	Л1.1 Л1.2Л2.3 Л2.5		КМ1	
4.2	Изучение реализации использования методов численного интегрирования в среде GNU Octave. /Ср/	2	5	УК-1-В2 ОПК-4-У2 ОПК-4-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Э1		КМ1	
Раздел 5. Итоговый коллоквиум								
5.1	Итоговый коллоквиум /Пр/	2	2	УК-1-31 УК-1-32 УК-1-У1 УК-1-У2 УК-1-В1 УК-1-В2 ОПК-4-31 ОПК-4-32 ОПК-4-33 ОПК-4-У1 ОПК-4-У2 ОПК-4-У3 ОПК-4-В1 ОПК-4-В2	Л1.1 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5Л3.1 Э1		КМ1	

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
--------	-------------------------	------------------------------------	------------------------

КМ1	Коллоквиум	УК-1-31;УК-1-32;УК-1-У1;УК-1-У2;УК-1-В1;УК-1-В2	<ol style="list-style-type: none"> 1. Понятие системы счисления. Десятичная, двоичная, троичная и шестнадцатеричная системы счисления, их преимущества, недостатки и области применения. 2. Типы чисел в ЭВМ. Преимущества и недостатки каждого из типов чисел. Нормальное и нормализованное представления чисел с плавающей точкой. 3. Стандарт IEEE 754-2008 – область действия и описываемые величины 4. Операция FMA. Число NaN, бесконечности и нули в IEEE 754 5. Уровни представления чисел в IEEE 754. Строение числа с плавающей точкой в стандарте IEEE 754. Возможные ошибки при вычислениях с плавающей точкой. 6. Знак, экспонента и мантисса числа с плавающей точкой в стандарте IEEE 754. Binary32 и binary64 7. Суть линейной регрессии. 8. Метод наименьших квадратов. Функция невязки. 9. Вывод формулы линейной регрессии. 10. Коэффициент детерминации. 11. Суть интерполяции. Кусочная и глобальная интерполяция. 12. Понятие нелинейной регрессии. 13. Линеаризуемые и нелинеаризуемые уравнения. 14. Метод Ньютона для нелинейной регрессии. 15. Метод Гаусса - Ньютона в регрессионном анализе. 16. Алгоритм Левенберга — Марквардта в регрессионном анализе. 17. Метод градиентного спуска. 18. Сплайн. Степень, порядок гладкости и дефект сплайна. 19. Многочлен Лагранжа. Вывод. 20. Квадратичный сплайн дефекта 1. 21. Кубический сплайн дефекта 1. 22. Метод прогонки трехдиагональных матриц. 23. Суть численного интегрирования. 24. Метод прямоугольников и метод трапеций. Метод Симпсона. Метод Чебышёва. Метод Монте-Карло.
-----	------------	---	--

5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)

Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Домашняя работа	УК-1-В2	Построение регрессионной линейной модели в двумерном пространстве по полученному у преподавателя индивидуальному набору экспериментальных данных. Определение коэффициента детерминации и предоставление соответствующих полученному результату выводов по целесообразности использования линейной регрессионной модели в конкретном случае.
P2	Самостоятельная работа № 1	УК-1-32;УК-1-В1;УК-1-В2	Самостоятельная работа на нахождение функции по имеющемуся дискретному набору экспериментальных данных и нахождение промежуточных значений кусочно-квадратичным и кусочной-кубическим сплайнами дефекта 1.
P3	Самостоятельная работа № 2		Самостоятельная работа на нахождение функции по имеющемуся дискретному набору экспериментальных данных и нахождение промежуточных значений кусочно-постоянной, кусочно-линейной, кусочно-квадратичной и кусочно-кубической интерполяциями.

5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (описание билетов, тестов и т.п.)

экзамен не предусмотрен

5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

Студент получает оценку за зачет, которая является оценкой за итоговый коллоквиум, при условии выполнения домашнего задания и 2 самостоятельных работ.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
---------------------	----------	------------	-------------------

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Трусов П. В.	Введение в математическое моделирование: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: Логос, 2004
Л1.2	Диков А. В., Степанова С. В., Сугробов Г. В.	Математическое моделирование и численные методы: учебное пособие	Электронная библиотека	Пенза: Пензенский государственный педагогический университет (ПГПУ), 2000
Л1.3	Бурова И. Г.	Аппроксимация вещественными и комплексными минимальными сплайнами: учебное пособие	Электронная библиотека	Санкт-Петербург: Издательство Санкт-Петербургского Государственного Университета, 2013
Л1.4	Мельниченко А. С.	Анализ данных в материаловедении. Ч. 2. Регрессионный анализ: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. 'Металлургия'	Библиотека МИСиС	М.: Изд-во МИСиС, 2014

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Алексеев Е. Р., Чеснокова О. В.	Введение в Octave: курс лекций	Электронная библиотека	Москва: Национальный Открытый Университет «ИНТУИТ», 2016
Л2.2	Ласица А. М.	Использование Matlab и GNU Octave в вычислительной физике: конспект лекций: курс лекций	Электронная библиотека	Омск: Омский государственный технический университет (ОмГТУ), 2017
Л2.3	Корнеев П. К., Тарасенко Е. О., Гладков А. В., Дерябин М. А.	Численные методы: учебное пособие	Электронная библиотека	Ставрополь: Северо-Кавказский Федеральный университет (СКФУ), 2018
Л2.4	Макаров В. Л., Хлобыстов В. В.	Сплайн-аппроксимация функций: Учеб. пособие для вузов	Библиотека МИСиС	М.: Высш. шк., 1983
Л2.5	Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.	Численные методы: учеб. пособие для студ. физико-мат. спец. вузов	Библиотека МИСиС	М.: БИНОМ, 2004

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Быков С. А., Гнездилова Н. А., Суздальская Е. А.	Математика и информатика: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2008

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Документация к GNU Octave (англ.) // GNU Octave: сайт. 2019. URL: https://www.gnu.org/software/octave/support.html (дата обращения: 14.06.2019).	https://www.gnu.org/software/octave/support.html		
----	---	---	--	--

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Microsoft Office			
П.2	LMS Canvas			
П.3	MS Teams			

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	Открытая информационно-справочная система http://www.codenet.ru/			
-----	---	--	--	--

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
------	------------	-----------

К-420	Аудитория для самостоятельной работы студентов	стационарные компьютеры - 10 шт., пакет лицензионных программ MS Office, доска аудиторная меловая/маркерная, комплект учебной мебели
Читальный зал электронных ресурсов		комплект учебной мебели на 55 мест для обучающихся, 50 ПК с доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus.
Любой корпус Мультимедийная	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и/или для проведения практических занятий:	комплект учебной мебели до 36 мест для обучающихся, мультимедийное оборудование, магнитно-маркерная доска, рабочее место преподавателя, ПКс доступом к ИТС «Интернет», ЭИОС университета через личный кабинет на платформе LMS Canvas, лицензионные программы MS Office, MS Teams, ESET Antivirus

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Студентам рекомендуется посещать все занятия. На практических занятиях в конспект следует заносить всё, что рекомендует преподаватель. Анализ результатов и отработка упражнений, изученных на практических занятиях, экономит время и способствует лучшему усвоению материала.

Студентам рекомендуется с самого начала освоения данного курса работать с литературой и предлагаемыми заданиями в форме подготовки к очередному аудиторному занятию. При этом актуализируются имеющиеся знания, а также создается база для усвоения нового материала, возникают вопросы, ответы на которые студент получает в аудитории. Рекомендуется сдавать выполненные самостоятельные работы и домашнее задание в течение 2-3 недель с момента раздачи.

При освоении данного курса студент должен пользоваться библиотекой вуза, а также электронными базами учебной литературы, в соответствии с настоящей программой.