

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы физики  
и исследований им. Ландау  
А.В. Рогачев**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Компьютерный дизайн материалов и лекарств
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Количество контрольных работ, заданий: 2

Программу составили:

А.В. Янилкин, канд. физ.-мат. наук

И.А. Круглов, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем 12.03.2025

## Аннотация

В рамках курса студенты будут ознакомлены с основными понятиями физики конденсированного состояния, машинного обучения и компьютерного дизайна новых материалов. В первом блоке будут разобраны необходимые термины и подходы материаловедения, такие как кристаллическая структура материала, плотность фоонных и электронных состояний и др., а также представлены подходы компьютерного дизайна новых материалов. Во втором блоке будут рассмотрены основные алгоритмы машинного обучения (линейная регрессия, нейронные сети, глубокое обучение) и показаны примеры их применения в компьютерном дизайне материалов. В третьем блоке будут разобраны характерные примеры информатики материалов.

Для многих из рассматриваемых методов машинного обучения и компьютерного дизайна материалов будут разобраны примеры их реализации, в том числе на языке Python в рамках библиотек `sklearn`, `keras` и `pytorch`. В конце курса студентам могут быть предложены актуальные научные задачи по дизайну новых материалов, необходимых для индустрии.

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

- ознакомление студентов с основными подходами компьютерного дизайна материалов и примерами задач по поиску новых материалов, в том числе решаемых с помощью алгоритмов машинного обучения.

### Задачи дисциплины

- Актуализация знаний студентов по основам физики конденсированного состояния применительно к материаловедению.
- Приобретение знаний и навыков пользования методами машинного обучения в различных аспектах физики конденсированного состояния.
- Получение навыков решения актуальных задач компьютерного дизайна материалов, в том числе с помощью методов машинного обучения.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или)	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения

разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные подходы компьютерного дизайна материалов.

уметь:

- формулировать задачу так, чтобы ее можно было решить с помощью методов компьютерного дизайна материалов; подбирать оптимальный для решения конкретной задачи алгоритм; анализировать полученные результаты.

владеть:

- основными понятиями физики конденсированного состояния, машинного обучения и компьютерного дизайна материалов; навыками работы с основными алгоритмами машинного обучения и компьютерного дизайна материалов.

### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.
--	---

№	Тема (раздел) дисциплины	Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в материаловедение.	2			2
2	Связь химический состав/структура – свойство.	4			4
3	Дизайн материалов.	2			2
4	Введение в машинное обучение .	2			2
5	Линейные модели в машинном обучении.	2			2
6	Нейронные сети и глубокое обучение.	3			3
7	Алгоритмы оптимизации, активное обучение.	3			3
8	Межатомные потенциалы взаимодействия на основе алгоритмов машинного обучения.	4			4
9	Информатика материалов.	4			4
10	Примеры успешного компьютерного дизайна материалов.	4			4
Итого часов		30			30
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

##### Семестр: 2 (Весенний)

##### 1. Введение в материаловедение.

Ключевые понятия, классы материалов и их свойства, тенденции в развитие и современное состояние материаловедения.

##### 2. Связь химический состав/структура – свойство.

Понятие связи химического состава и структуры материалов с их свойствами. Подходы и методы для поиска этой связи. Многомасштабное моделирование информатика материалов. Примеры разработанных моделей на определения свойств материалов.

##### 3. Дизайн материалов.

Понятие компьютерного дизайна материалов, основные цели и проблемы. Обзор методов дизайна материалов как способа поиска материалов с заданными свойствами. Примеры лучших мировых практик.

##### 4. Введение в машинное обучение .

Что такое машинное обучение? Постановка задачи машинного обучения, классификация алгоритмов согласно решаемым задачам. Знакомство с библиотеками Python, содержащими большое количество полезных инструментов: от быстрых операций с многомерными массивами до визуализации и реализации различных математических методов (numpy, scipy, matplotlib, pandas).

##### 5. Линейные модели в машинном обучении.

Изучение одного из основных способов решения задач машинного обучения — линейных моделей. Оптимизация гиперпараметров алгоритмов и их применение в различных задачах регрессии и классификации. Проблема переобучения и способы борьбы с ней. Кросс-валидация как оценка способности алгоритма давать хорошие предсказания на новых данных. Разбор основных метрик качества линейных моделей.

#### 6. Нейронные сети и глубокое обучение.

Определение нейронной сети как математического алгоритма. Структура нейронной сети и методы оптимизации ее гиперпараметров. Метод обратного распространения ошибки. Переобучение нейронных сетей. Описание сверточных и графовых нейронных сетей.

#### 7. Алгоритмы оптимизации, активное обучение.

Изучение основных алгоритмов оптимизации функций, в том числе Байесовской оптимизации и эволюционного алгоритма. Примеры применения алгоритмов оптимизации в компьютерном материаловедении. Активное обучение как способ определения степени экстраполяции моделей машинного обучения.

#### 8. Межатомные потенциалы взаимодействия на основе алгоритмов машинного обучения.

Описание понятия межатомных потенциалов, а также объяснение необходимости их использования в решении задач компьютерного дизайна материалов. Изучение основных типов межатомных потенциалов на основе алгоритмов машинного обучения: GAP, MTP, SNAP и др. Обучение межатомного потенциала MTP на предложенной базе данных в ходе практического занятия для расчета температуры плавления алюминия.

#### 9. Информатика материалов.

Определение понятия “информатика материалов”. Поиск взаимосвязей между структурой и свойствами материалов с помощью методов информатики материалов. Решение практических задач по предсказанию механических свойств сталей, ширины запрещенной зоны и других свойств с помощью методов информатики материалов. Обучение графовых нейронных сетей для решения задач информатики материалов.

#### 10. Примеры успешного компьютерного дизайна материалов.

Демонстрации возможностей и успешного использования компьютерного дизайна материалов в прикладных целях на основе двух примеров: алюминиевые сплавы для аэрокосмического применения и металл-органические каркасы для хранения водорода. Используемые методы машинного обучения для построения моделей, поиска и оптимизации материалов, анализа точности и экспериментальная валидация.

### 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория с проектором.

### 6. Перечень рекомендуемой литературы

#### Основная литература

1. Флах, Петер. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных, 2017.
2. Géron, Aurélien. Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. " O'Reilly Media, Inc.", 2017.

#### Дополнительная литература

1. Мюллер, А., and С. Гвидо. "Введение в машинное обучение с помощью Python." Руководство для специалистов по работе с данными, 2017.
2. Миркин, Б. Г. "Введение в анализ данных: учебник и практикум для бакалавриата и магистратуры", 2014.
3. Li, J., Zhang, Y., Cao, X. et al. Accelerated discovery of high-strength aluminum alloys by machine learning. *Commun Mater* 1, 73 (2020).
4. Ahmed, A., Seth, S., Purewal, J. et al. Exceptional hydrogen storage achieved by screening nearly half a million metal-organic frameworks. *Nat Commun* 10, 1568 (2019).

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

<https://ru.coursera.org/specializations/machine-learning-data-analysis>  
<https://yandexdataschool.ru/edu-process/courses/machine-learning>  
<https://lectoriy.mipt.ru/course/MachineLearning-L/lectures>

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Не предусмотрено.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра вычислительной физики конденсированного состояния и живых систем
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Экзамен

#### Разработчики:

А.В. Янилкин, канд. физ.-мат. наук

И.А. Круглов, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
	ОПК-4.3 Способен аргументировано выбирать способ проведения научного исследования
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)



исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области

ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Компьютерный дизайн материалов и лекарств» обучающийся должен:

### знать:

- основные подходы компьютерного дизайна материалов.

### уметь:

- формулировать задачу так, чтобы ее можно было решить с помощью методов компьютерного дизайна материалов; подбирать оптимальный для решения конкретной задачи алгоритм; анализировать полученные результаты.

### владеть:

- основными понятиями физики конденсированного состояния, машинного обучения и компьютерного дизайна материалов; навыками работы с основными алгоритмами машинного обучения и компьютерного дизайна материалов.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

### Задание 1.

Для предоставленной базы данных по свойствам определенного класса материалов предложить модель машинного обучения для предсказания свойства на основе характеристик материалов из базы данных. Определить точность обучения модели и ее предсказания. При разработке модели допускается преобразование и дополнение исходных характеристик материалов. Модель машинного обучения и ее параметры обучающиеся выбирают сами.

### Задание 2.

Для предоставленной базы данных по свойствам определенного класса материалов провести поиск новых материалов с улучшенными свойствами и оценку точности прогноза свойств. Модель для предсказания свойств и алгоритм оптимизации характеристик материала обучающиеся выбирают самостоятельно.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Ключевые направления современного развития материаловедения?
2. Какие существуют подходы для создания моделей связи химического состава/структуры – свойство?
3. Дизайн материалов: цели, методы и подходы и проблемы?
4. В чем состоит принцип работы алгоритма градиентного спуска?
5. Что такое линейная регрессия, и какие способы регуляризации в ней могут использоваться?
6. В чем состоит принцип и для чего используется метод кросс-валидации?
7. Какие возможные функции активации используются в нейронных сетях?
8. Какие методы предотвращения переобучения (регуляризации) для нейронных сетей вы знаете? Как они работают?
9. Привести примеры алгоритмов глубокого обучения. Почему они выделяются в отдельный класс методов?
10. Проведите сравнение по точности и скорости работы в расчете энергии и межатомных сил с помощью теории функционала плотности и межатомных потенциалов?
11. В чем заключается принцип обучения межатомных потенциалов на основе алгоритмов машинного обучения?
12. Приведите примеры межатомных потенциалов на основе алгоритмов машинного обучения?

13. Привести алгоритмы, использующиеся для оптимизации.
14. Что такое информатика материалов? Какие задачи возможно решать с помощью данного класса методов?
15. Какие подходы существуют для формирования признаков?

Примеры контрольных заданий:

1. С использованием градиентного спуска провести минимизацию по параметрам функцию ошибок в линейной регрессии.
2. Выбрать архитектуру и функцию активации для нейронной сети, обучить ее и сравнить ошибку предсказания (на кросс-валидации) с методом линейной регрессии.
3. Для предложенного датасета обучить потенциал МТР и рассчитать ошибку предсказания энергий и межатомных сил.
4. Для предложенной базы данных по свойствам материалов определить наиболее подходящий алгоритм машинного обучения.
5. Для предложенной базы данных по свойствам материалов определить наиболее важные признаки, дать физическую интерпретацию.

Примеры билетов:

Билет 1.

1. Ключевые направления современного развития материаловедения?
2. Какие возможные функции активации используются в нейронных сетях?

Билет 2.

1. Какие существуют подходы для создания моделей связи химического состава/структуры – свойство?
2. В чем состоит принцип и для чего используется метод кросс-валидации?

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Экзамен проводится в устной форме по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.