Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра комп'ютерної фізики

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Директор навчально-наукового інституту
комп'ютерної фізики та енергетики
_____ Ірина ГАРЯЧЕВСЬКА
"28" серпня 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ПРИКЛАДНІ ПАКЕТИ В ЧИСЕЛЬНОМУ МОДЕЛЮВАННІ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ

рівень вищої освіти	другий (магістерський)
галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма	Комп'ютерна фізика
вид дисципліни	за вибором
ННІ	Комп'ютерної фізики та енергетики

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою інституту

28 серпня 2023 року, протокол № 8/23

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:
Овчаренко Антон Ігорович, асистент кафедри комп'ютерної фізики

Програму схвалено на засіданні кафедри комп'ютерної фізики

Протокол від 28 серпня 2023 року № 8/23

Завідувач кафедри комп'ютерної фізики

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

Програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми «Комп'ютерна фізика»

Гарант освітньо-наукової програми «Комп'ютерна фізика»

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

Програму погоджено науково-методичною комісією
навчально-наукового інституту комп'ютерної фізики та енергетики

Протокол від 28 серпня 2023 року № 8/23

Голова науково-методичної комісії
навчально-наукового інституту комп'ютерної фізики та енергетики

_____ Денис ПРОТЕКТОР

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Прикладні пакети в чисельному моделюванні задач математичної фізики» складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки

другого (магістерського) рівня вищої освіти.

спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «Прикладні пакети в чисельному моделюванні задач математичної фізики» є ознайомлення з можливостями та отримання практичних навичок роботи з сучасними програмними бібліотеками для вирішення широкого спектру задач, зокрема в енергетиці.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

Основними завданнями вивчення дисципліни «Прикладні пакети в чисельному моделюванні задач математичної фізики» вирішення прикладних практичних завдань за допомогою можливостей сучасних бібліотек розробки.

Загальні компетентності (ЗК):

1. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК4).
2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК5).
3. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел (ЗК6).
4. Здатність працювати автономно (ЗК9).
5. Навики здійснення безпечної діяльності (ЗК10).
6. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК11).
7. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні (ЗК13).
8. Здатність перетворювати наукові проблеми в загальні обчислювальні моделі та зрозуміти, як різні джерела помилок впливають на точність та надійність моделей та обчислені результати (ЗК17).

Спеціальні (фахові) компетентності (СК):

1. Здатність оптимально визначити матеріальні засоби, необхідні для проведення наукового дослідження або науково-технічної розробки (матеріали, апаратура, обладнання, обчислювальна техніка та інше). (СК2)
2. Здатність відповідно до поставленої задачі проводити самостійно та в команді наукові дослідження фізичних систем, явищ і процесів (експериментальні, теоретичні, комп’ютерне моделювання) в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.. (СК4)
3. Вміння аналізувати та візуально відображати результати обчислень та оцінювати їх відповідність стосовно основних проблем та / або гіпотез. (СК7)
4. Вміння програмувати на мовах високого рівня, компілювати мови та ефективно використовувати комп'ютерну систему алгебри. (СК9)
5. Вміння підвищувати ефективність чисельних алгоритмів та відповідного програмного забезпечення. (СК10)

1.3. Кількість кредитів – 5

1.4. Загальна кількість годин – 150

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	-й
Семестр	
1-й	-й
Лекції	
32 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
год.	год.
Лабораторні заняття	
32 год.	год.
Самостійна робота	
86 год.	год.
у тому числі індивідуальні завдання	
год.	

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати:

основні принципи програмування, що лежать в основі використання бібліотек, що вивчаються; загальні принципи роботи бібліотек, їх можливості та типові випадки використання

вміти:

застосовувати отримані знання на практиці для вирішення широкого спектру завдань, зокрема в енергетиці, писати грамотні програми, вміти знаходити помилки і покращувати окремо взяти вирішення.

Програмні результати навчання:

ПРН1. Використовувати знання в галузі прикладної фізики, математики, електроніки та інформаційних технологій для виконання наукових досліджень та розв'язання виробничих задач.

ПРН2. Знаходити та аналізувати наукову та науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики та наноматеріалів із вітчизняних та зарубіжних джерел, в тому числі з використанням сучасних пошукових систем.

ПРН4. Встановлювати та аргументувати нові залежності між параметрами та характеристиками фізичних систем.

ПРН8. Вміти розроблювати гіпотези та запропоновувати способи їх перевірки за допомогою відповідних аналітичних, експериментальних та чисельних інструментів.

ПРН12. Критично розуміти наукові методи, мати краще розуміння наукового процесу як такого, а також розуміти перспективи майбутньої роботи.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Стандартна бібліотека Python.

Тема 1. Мова Python для інженерів та фізиків-дослідників.

Основи програмування на мові Python, її переваги і використання на практиці. Початок роботи. Порівняння з іншими засобами та пакетами.

Тема 2. Стандартна бібліотека Python.

Робота з вводом/виводом. Тестування. Логування. Об'єктно орієнoване програмування.

Розділ 2. Професійні бібліотеки для мови Python.

Тема 1. Бібліотека Sci-kit Learn.

Задачі та можливості бібліотеки. Основні функції і структури, поняття і концепції. Приклади програм.

Тема 2. Бібліотека PyTorch.

Задачі та можливості бібліотеки. Основні функції і структури, поняття і концепції. Приклади програм.

Тема 3. Бібліотеки для вирішення фізичних задач.

Приклади відкритих бібліотек для розрахунку розсіювання світла методом RCWA та/або FDFD. Розбір їх роботи. Практичне використання.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Стандартна бібліотека Python.												
Тема 1. Мова Python для інженерів та фізиків-дослідників.	22	4		4		14						
Тема 2. Стандартна бібліотека Python.	30	8		8		14						
Разом за розділом 1	52	12		12		28						
Розділ 2. Професійні бібліотеки для мови Python.												
Тема 1. Бібліотека Sci-kit Learn.	31	6		6		19						
Тема 2. Бібліотека PyTorch.	33	7		7		19						
Тема 3. Бібліотеки для вирішення фізичних задач.	34	7		7		20						
Разом за розділом 3	98	20		20		58						
Усього годин	150	32		32		86						

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Мова Python для інженерів та фізиків-дослідників.	4
2	Стандартна бібліотека Python.	8
3	Бібліотека Sci-kit Learn.	6
4	Бібліотека PyTorch.	7
5	Бібліотеки для вирішення фізичних задач.	7
	Разом	32

5. Завдання для самостійної робота

Самостійно опрацювати матеріали за наступними темами:

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Стандартна бібліотека Python.	28
2	Професійні бібліотеки для мови Python.	58
	Разом	86

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом

7. Методи навчання

Пояснювально-ілюстративний; репродуктивний; дослідницький; частково-пошуковий.

8. Методи контролю

На заняттях – опитування. По закінченні розділу – перевірка результатів самостійної роботи. Протягом семестру – контрольні роботи. Форма підсумкового контролю знань – екзамен.

9. Схема нарахування балів

Приклад для підсумкового семестрового контролю в формі заліку без виконання залікової роботи

		Сума								
Розділ 1		Розділ 2			Контрольні роботи, передбачені навчальним планом		Індивідуальне завдання	Разом	Залік	
Т1	Т2	Т1	Т2	Т3						
8	8	8	8	8	10	10		60	40	100

Критерії оцінювання навчальних досягнень

Мінімальна кількість балів для допуску до підсумкового контролю становить – 20 балів.

1. **Поточне оцінювання – кількість балів за тему згідно списку. Усього за 6 тем – 40 балів**

Робота в аудиторії та самостійна робота:

Тема 1:

Правильність відповіді	5 балів
Знання цілей задачі	3 бали

Теми 2-5:

Відсутність помилок в розрахунках	3 бали
Правильність відповіді	3 бали
Знання цілей задачі	2 бали

2. **Контрольна робота – 10 балів**

Типовий варіант контрольної роботи

1. Які задачі можна вирішити за допомогою алгоритму K-means? Як досягається результат? (5 балів).
2. Наведіть приклад реалізації алгоритму градієнтного спуску за допомогою бібліотеки Sci-kit Learn. (5 балів).

3. Заключне оцінювання – 40 балів за залік

Типовий білет

1. Що таке тензор в бібліотеці PyTorch? Як він пов'язан зі знайомої вам матриці з курсу лінійної алгебри? (10 балів)
2. Який клас задач вирішується за допомогою бібліотеки Sci-kit Learn? Наведіть приклади. (10 балів)
3. Для чого використовується pipeline в Sci-kit Lean? Наведіть приклади використання. (10 балів)
4. Написати приклад програми, що числено рахує похідну за допомогою інструментів PyTorch. (10 балів)

Питання 1 (10 балів)

Відсутність помилок в теоретичній частині – 5 балів
Повнота викладок – 5 балів

Питання 2 (10 балів)

Відсутність помилок в теоретичній частині – 3 балів
Повнота викладок – 3 балів
Наявність прикладів – 4 бали

Питання 3 (10 балів)

Відсутність помилок в теоретичній частині – 3 балів
Повнота викладок – 3 балів
Наявність прикладів – 4 бали

Питання 4 (10 балів)

Наявність відповіді – 1 бал
Правильність відповіді – 3 бали
Відсутність помилок в розрахунках – 3 бали
Логічність викладок – 3 бали

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	

50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

10. Рекомендована література

Основна література

1. Lutz, Mark. *Learning python: Powerful object-oriented programming*. " O'Reilly Media, Inc.", 2013.
2. Eric Matthes, Ольга Бєлова. *Пришвидшений курс Python. Практичний, проєктно-орієнтований вступ до програмування*, Видавництво Старого Лева, 2021.

Допоміжна література

1. Géron, Aurélien. *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow*. "O'Reilly Media, Inc.", 2022.

11. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. https://pytorch.org/tutorials/beginner/deep_learning_60min_blitz.html