

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по безопасности и общим вопросам

Дата подписания: 30.01.2023 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)

Прикладные области анализа больших данных. Дизайн новых материалов

Закреплена за подразделением Кафедра магистерская школа информационных бизнес систем

Направление подготовки 09.04.02 ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Профиль Экосистема больших данных для цифровой трансформации

Квалификация **Магистр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

в том числе:

аудиторные занятия 20

самостоятельная работа 88

Формы контроля в семестрах:
зачет 3

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	УП	РП		
Неделя	19			
Вид занятий	УП	РП	УП	РП
Лекции	12	12	12	12
Практические	8	8	8	8
В том числе инт.	8		8	
Итого ауд.	20	20	20	20
Контактная работа	20	20	20	20
Сам. работа	88	88	88	88
Итого	108	108	108	108

Программу составил(и):
ассистент, Сиднов К.

Рабочая программа

Прикладные области анализа больших данных. Дизайн новых материалов

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 09.04.02 ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (приказ от 05.03.2020 г. № 95 о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

09.04.02 ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ, 09.04.02-МИСТ-22-2.plx Экосистема больших данных для цифровой трансформации, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 22.09.2022, протокол № 8-22

Утверждена в составе ОПОП ВО:

09.04.02 ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ, Экосистема больших данных для цифровой трансформации, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 22.09.2022, протокол № 8-22

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра магистерская школа информационных бизнес систем

Протокол от 24.06.2022 г., №10

Руководитель подразделения Нежурина М.И.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Целью освоения дисциплины является формирование междисциплинарной компетенции учащихся в областях, связанных с дизайном новых материалов на основе анализа данных. Для формирования данной компетенции обучающиеся, в ходе освоения данной дисциплины, должны ознакомиться с основами моделирования материалов из первых принципов; со способами описания объектов в прикладной области, которые могут быть использованы для создания моделей анализа данных, а также с описанием и характеристикой необходимых для дальнейшего анализа результатов моделирования, на основе которых могут быть созданы базы больших данных.
-----	--

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.В.ДВ.01
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Информационные технологии в офисной деятельности	
2.1.2	Практика моделирования бизнес-процессов	
2.1.3	Научно-исследовательская работа. Учебный проект	
2.1.4	Программные платформы и технологии больших данных	
2.1.5	Специальные главы математики. Часть 2	
2.1.6	Языки программирования для работы с большими данными	
2.1.7	Новые направления и технологии современных СУБД	
2.1.8	Системная инженерия цифрового предприятия	
2.1.9	Специальные главы математики. Часть 1	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Научно-исследовательская работа	
2.2.2	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.3	Производственная проектная практика	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-4: Способен выполнять работы по сбору, обработке и анализу больших данных в междисциплинарных областях	
Знать:	
ПК-4-31	Способы реализации параллельных вычислений для дизайна новых материалов
ОПК-1: Способен самостоятельно приобретать, развивать и применять математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания для решения нестандартных задач, в том числе в новой или незнакомой среде и в междисциплинарном контексте	
Знать:	
ОПК-1-31	Основные постановки современных задач для дизайна новых материалов
ПК-4: Способен выполнять работы по сбору, обработке и анализу больших данных в междисциплинарных областях	
Уметь:	
ПК-4-У1	Разрабатывать модели представления данных для решения задач машинного обучения в предметной области
ОПК-1: Способен самостоятельно приобретать, развивать и применять математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания для решения нестандартных задач, в том числе в новой или незнакомой среде и в междисциплинарном контексте	
Уметь:	
ОПК-1-У1	Формализовывать задачи в прикладной области

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. Прикладные области анализа больших данных: дизайн новых материалов							

1.1	Тема №1. Дизайн новых материалов, как прикладная область анализа больших данных. /Лек/	3	4	ОПК-1-31	Л1.2 Л1.4 Э4	Доп. материал: конспект лекций		
1.2	Практические примеры научно-обоснованного подхода к дизайну новых материалов, выполнение практической работы №1. /Пр/	3	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1	Э3	Доп.материал: Сборник методов в формате ".ipynb". совместимый с открытой веб-платформой "Google Colab"		P1
1.3	Применение баз данных результатов первопринципного моделирования. Выполнение домашней работы №1. /Ср/	3	30	ОПК-1-У1	Э5			P4
1.4	Тема №2. Основы физики твердого тела /Лек/	3	4	ОПК-1-31	Л1.3Л2.3Л3. 1 Э8	Доп. материал: конспект лекций		
1.5	Способы описания твердых тел. Признаковое описание твердых тел. Выполнение практической работы №2. /Пр/	3	2	ОПК-1-31 ОПК-1-У1	Л1.3	Доп.материал: Сборник методов в формате ".ipynb". совместимый с открытой веб-платформой "Google Colab"		P2
1.6	Классификация кристаллических твердых тел по ключевым признакам, описание твердых тел для моделирования из первых принципов. Выполнение домашней работы №2. /Ср/	3	30	ОПК-1-У1	Э2 Э3			P5
1.7	Тема №3. Основы и применение теории функционала электронной плотности /Лек/	3	4	ПК-4-31	Л1.1 Л2.3	Доп. материал: конспект лекций		
1.8	Практика моделирования из первых принципов в рамках теории функционала плотности. Выполнение практической работы №3. /Пр/	3	2	ПК-4-31 ПК-4-У1	Л2.1 Л2.2Л3.2 Э6			P3

1.9	Классификация результатов компьютерного моделирования материалов из первых принципов. Выбор ключевых признаков для обучения моделей машинного обучения, кластеризация данных, корреляция признаков. Визуализация больших данных в дизайне новых материалов. Выполнение домашней работы №3. /Ср/	3	28	ПК-4-У1	Э1 Э2	Доп.материал: Сборник методов в формате ".ipynb". совместимый с открытой веб-платформой "Google Colab"		Р6
-----	---	---	----	---------	-------	--	--	----

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	не применяется		не применяется

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
Р1	Практическая работа №1	ОПК-1-31;ОПК-1-У1	Анализ упругих свойств бинарных и тройных соединений на основе алюминия с помощью баз данных результатов моделирования из первых принципов и практического применения для решения исследовательских задач
Р2	Практическая работа №2	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ПК-4-У1	Признаковое описание бинарных и тройных соединений на основе алюминия
Р3	Практическая работа №3	ПК-4-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-31	Определение упругих свойств бинарных и тройных соединений на основе алюминия с помощью моделирования в рамках теории функционала электронной плотности
Р4	Домашняя работа №1	ОПК-1-31;ОПК-1-У1	Анализ структуры базы данных Materials Project
Р5	Домашняя работа №2	ОПК-1-31;ОПК-1-У1	Анализ структуры базы данных Materials Project Описание кристаллической структуры соединений и сплавов для моделирования в рамках теории функционала электронной плотности
Р6	Домашняя работа №3	ПК-4-У1;ПК-4-31	Подготовка набора данных для построения модели машинного обучения для прогнозирования упругих свойств бинарных и тройных соединений на основе алюминия

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)

Для прохождения аттестации необходимо выполнение следующих условий:

1. Выполнение всех предусмотренных по дисциплине практических работ (балльная система оценивания);
2. Выполнение всех предусмотренных по дисциплине домашних заданий (балльная система оценивания).

Система оценивания видов учебной деятельности по разделу "Практика машинного обучения для дизайна новых материалов":

1. Методика оценки практической работы №1: "Анализ упругих свойств бинарных и тройных сплавов на основе алюминия с помощью баз данных результатов моделирования из первых принципов и практического применения для решения исследовательских задач"

Максимальное число баллов – 20 баллов.

2. Методика оценки практической работы №2: "Признаковое описание бинарных и тройных сплавов на основе алюминия"

Максимальное число баллов – 20 баллов.

3. Методика оценки практической работы №3: "Определение упругих свойств бинарных и тройных сплавов на основе алюминия с помощью моделирования в рамках теории функционала электронной плотности"

Максимальное число баллов – 15 баллов.

Домашняя работа №1: "Анализ структуры базы данных Materials Project"

Максимальное число баллов – 15 баллов.

Домашняя работа №2: "Описание кристаллической структуры соединений и сплавов для моделирования в рамках теории функционала электронной плотности"

Максимальное число баллов – 15 баллов.

Домашняя работа №3: "Подготовка набора данных для построения модели машинного обучения для прогнозирования упругих свойств бинарных и тройных сплавов на основе алюминия"

Максимальное число баллов – 15 баллов.

По итогам контроля знаний по сумме набранных баллов студенту выставляется оценка:

«зачет» – от 61 до 100 баллов;

«незачет» – от 0 до 60 баллов.

Максимальное число баллов по дисциплине – 100 баллов.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Гейзенберг В., Шрёдингер Э., Дирак П., Иваненко Д.	Современная квантовая механика	Электронная библиотека	Москва, Ленинград: Государственное технико-теоретическое изд-во, 1934
Л1.2	Аленичева Е. В., Гиясова И. В., Кожухина О. Н.	Материаловедение: конспект лекций: курс лекций	Электронная библиотека	Тамбов: Тамбовский государственный технический университет (ТГТУ), 2011
Л1.3	Киттель Ч.	Введение в физику твердого тела	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1978
Л1.4	Алпайдин Э.	Машинное обучение: новый искусственный интеллект: пер. с англ.	Библиотека МИСиС	М.: Альпина Паблишер, 2017

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Шелудько В. М.	Основы программирования на языке высокого уровня Python: учебное пособие	Электронная библиотека	Ростов-на-Дону, Таганрог: Южный федеральный университет, 2017
Л2.2	Шелудько В. М.	Язык программирования высокого уровня Python: функции, структуры данных, дополнительные модули: учебное пособие	Электронная библиотека	Ростов-на-Дону, Таганрог: Южный федеральный университет, 2017
Л2.3	Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.	Т. 7: Теория упругости	Библиотека МИСиС	, 1965

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
ЛЗ.1	Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.	Краткий курс теоретической физики	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1972
ЛЗ.2	Балджи А. С., Хрипунова М. Б., Александрова И. А.	Математика на Python: учебно-методическое пособие	Электронная библиотека	Москва: Прометей, 2018

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Google Colab		https://colab.research.google.com/
Э2	Обзорная статья о применении машинного обучения для дизайна новых материалов (Nature, 2019)		https://www.nature.com/articles/s41524-019-0221-0#:~:text=Machine%20learning%20in%20materials%20science%20is%20mostly%20concerned%20with%20supervised,major%20challenges%20in%20material%20informatics.&text=This%20allows%20the%20application%20of%20the%20data%20for%20new%20purposes.
Э3	Общая информация о применении машинного обучения в моделировании и разработке новых материалов (InfoMat, 2019)		https://www.researchgate.net/publication/335717921_Machine_learning_in_materials_science
Э4	Пионерская работа в области анализа баз данных и машинного обучения для дизайна новых материалов		https://perssongroup.lbl.gov/papers/prl2003-datamining.pdf
Э5	Работа посвященная созданию базы больших данных на основе результатов первопринципного моделирования		https://perssongroup.lbl.gov/papers/scc2012-materialsproject.pdf
Э6	Библиотека Python с открытым исходным кодом для анализа материалов		https://pymatgen.org/
Э7	Учебно-методическое пособие		http://www.unn.ru/books/met_files/Intro_DFT.pdf
Э8	Лекции по курсу Квантовая механика		https://mipt.ru/online/teorphys/kvantmekh-osen2020-gets.php

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	ОС Linux (Ubuntu) / Windows
П.2	VESTA
П.3	LMS Canvas

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	https://materialsproject.org/
-----	---

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
М-105	Мультимедийный тренинговый учебный класс:	рабочее место преподавателя, оборудованное персональным компьютером, пакет лицензионных программ MS Office; проектор; экран; маркерная доска; комплект учебной мебели
М-105	Мультимедийный тренинговый учебный класс:	рабочее место преподавателя, оборудованное персональным компьютером, пакет лицензионных программ MS Office; проектор; экран; маркерная доска; комплект учебной мебели
М-102	Аудитория для самостоятельной работы студентов и курсового проектирования:	Комплект учебной мебели на 12 рабочих мест, ноутбуки с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Большая часть работы по освоению программы дисциплины отводится для самостоятельной работы. Качественное освоение дисциплины возможно только при систематической самостоятельной работе.

Работа над конспектом лекции.

Основу теоретического обучения студентов составляют лекции. Они дают систематизированные знания студентам о наиболее сложных и актуальных проблемах изучаемой дисциплины. На лекциях особое внимание уделяется усвоению студентами изучаемых проблем, развитию их профессионально-значимых свойств и качеств. Лекции по учебной дисциплине проводятся в форме диалога, с использованием подготовленного материала – презентации. Работу над

конспектом следует начинать с его доработки, желательно в тот же день, пока материал еще легко воспроизводим в памяти. С целью доработки необходимо прочитать записи, восстановить текст в памяти, а также исправить описки, расшифровать непринятые ранее сокращения, заполнить пропущенные места, понять текст, вникнуть в его смысл. Далее прочитать материал по рекомендуемой литературе, разрешая в ходе чтения возникшие ранее затруднения, вопросы, а также дополняя и исправляя свои записи. Записи должны быть наглядными, для чего следует применять различные способы выделений. В ходе доработки конспекта углубляются, расширяются и закрепляются знания, а также дополняется, исправляется и совершенствуется конспект. Подготовленный конспект и рекомендуемая литература используются при подготовке к практическим занятиям. Подготовка сводится к внимательному прочтению учебного материала, к выводу с карандашом в руках всех утверждений и формул, к решению примеров, задач, к ответам на вопросы. Примеры, задачи, вопросы по теме являются средством самоконтроля.

Подготовка к практическому занятию.

Для успешного освоения материала студентам рекомендуется сначала ознакомиться с учебным материалом, изложенным в лекциях и основной литературе, затем выполнить самостоятельные задания, при необходимости обращаясь к дополнительной литературе. При подготовке к практическим занятиям можно выделить два этапа:

- организационный, на котором студент планирует свою самостоятельную работу,
- рабочий, на котором осуществляется непосредственная подготовка студента к занятию.

Самостоятельная работа с рекомендованной литературой.

При работе с основной и дополнительной литературой целесообразно придерживаться такой последовательности. Сначала ознакомиться с содержанием всего заданного материала, чтобы составить представление об изучаемых разделах научного знания. После чего, используя конспект лекций выделить разделы, представляющие собой развернутое изложение темы лекции или методов, используемых на практических занятиях. Затем прочитать вторично, чтобы в ходе чтения понять и запомнить смысл каждого положения и вопроса в целом. Продуктивно сопровождать чтение записями (план прочитанного текста, тезисы, выписки, конспектирование и др.). Если содержание материала несложное, легко усваиваемое, можно ограничиться составлением плана. Если материал содержит новую и трудно усваиваемую информацию, целесообразно его законспектировать.

Для усвоения курса, в качестве вспомогательной литературы рекомендуются к использованию:

- 1 R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Methods*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2004
- 2 M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, *Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients*, *Rev. Mod. Phys.* 64:1045–1097, 1992
- 3 Бринк Х., Ричардс Дж., Феверолф М. *Машинное обучение*. СПб: Питер, 2017.