

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. Материаловедение

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	
	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):

к.т.н., Дир.НИИЦ, Хван А.В.; PhD, с.н.с., Кондратьев А.В.; к.т.н., с.н.с., Чеверикин В.В.

Рабочая программа

Прикладные области анализа больших данных.Материаловедение

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 М.И. Нежурина

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	В результате изучения дисциплины обучающийся должен ознакомиться с использованием термодинамического моделирования и комбинирования методов термодинамического моделирования с методами машинного обучения в приложении к реальным многокомпонентным химическим системам, а также узнать способы применения данных методов для решения различных производственных задач, в таких процессах как кристаллизация и литье, термическая обработка, экстракция, модифицирование, сварка, пайка.
-----	---

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	Современный опыт использования анализа больших данных
ПК-4-32	Предметная область анализа данных
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 принципы выбора термодинамических баз данных для проведения расчетов
ПК-4: Способен выполнять работы по сбору, обработке и анализу больших данных в междисциплинарных областях	
Уметь:	
ПК-4-У2	Проводить сравнительный анализ методов и инструментальных средств анализа данных
ПК-4-У1	Проводить анализ данных
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	Работать на современном программном обеспечении для проведения термодинамических расчетов
ПК-4: Способен выполнять работы по сбору, обработке и анализу больших данных в междисциплинарных областях	
Владеть:	
ПК-4-В2	Навыками оценки соответствия набора данных предметной области и задачам аналитических работ
ПК-4-В1	Навыками выбора методов и инструментальных средств для проведения аналитических работ

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

Владеть:

ОПК-1-В1 Навыками проведения термодинамических расчетов

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. Раздел 1. Основы химической термодинамики. Введение в расчетную термодинамику							
1.1	Лекция 1. Основы химической термодинамики. Введение в расчетную термодинамику /Лек/	3	3	ПК-4-32 ОПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1			
1.2	Самостоятельная работа №1 Введение в расчетную термодинамику /Ср/	3	10	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1			Р1
1.3	Лекция 2. Модели растворов /Лек/	3	3	ПК-4-31 ОПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			
1.4	Самостоятельная работа № 2 Модели растворов /Ср/	3	10	ПК-4-31 ПК-4-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р2
1.5	Лекция 3. Критический анализ данных /Лек/	3	3	ПК-4-31 ПК-4-У1 ПК-4-У2 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			
1.6	Самостоятельная работа №3 Критический анализ данных /Ср/	3	10	ПК-4-31 ПК-4-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р3
1.7	Практическая работа № 1 Расчет термодинамических свойств в однокомпонентной систем /Пр/	3	2	ПК-4-У1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р5
1.8	Самостоятельная работа №4 Расчет термодинамических свойств в однокомпонентной системе /Ср/	3	10	ПК-4-31 ПК-4-У1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р5
1.9	Практическая работа № 2 Расчет параметров смещения в двухкомпонентной системе /Пр/	3	2	ПК-4-У1 ПК-4-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р6
1.10	Самостоятельная работа №5 Расчет параметров смещения в двухкомпонентной системе /Ср/	3	8	ПК-4-У1 ПК-4-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			Р7

1.11	Практическая работа № 3 Расчет фазовых диаграмм и свойств сплавов в двухкомпонентной системе /Пр/	3	2	ПК-4-У1 ПК-4-В1 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			P8
1.12	Самостоятельная работа №6 Расчет фазовых диаграмм и свойств сплавов в двухкомпонентной системе /Ср/	3	8	ПК-4-У1 ПК-4-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			P9
Раздел 2. Раздел 2. Моделирование свойств материалов								
2.1	Лекция 4. Моделирование свойств расплавов /Лек/	3	1	ПК-4-31 ОПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э2			
2.2	Самостоятельная работа №7 Моделирование свойств расплавов /Ср/	3	4	ПК-4-31 ПК-4-У1 ПК-4-У2 ПК-4-В1 ОПК-1-31 ОПК-1-У1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э2			P10
2.3	Практическая работа № 4 Применение физических моделей для описания термофизических свойств /Пр/	3	2	ПК-4-У1 ПК-4-У2 ПК-4-В1 ПК-4-В2 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э2			P11
2.4	Самостоятельная работа №8 Применение физических моделей для описания термофизических свойств /Ср/	3	10	ПК-4-31 ПК-4-У1 ПК-4-У2 ПК-4-В1 ПК-4-В2 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э2			P12
2.5	Лекция 5. Связь структуры и свойств в промышленных материалах /Лек/	3	1	ПК-4-31 ОПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			
2.6	Самостоятельная работа №9 Связь структуры и свойств в промышленных материалах /Ср/	3	10	ПК-4-31 ПК-4-У1 ПК-4-У2 ПК-4-В1 ПК-4-В2 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			P13
2.7	Лекция 6. Методы оптимизации термодинамических свойств /Лек/	3	1	ПК-4-31 ОПК-1-31	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			
2.8	Самостоятельная работа № 10 Методы оптимизации термодинамических свойств /Ср/	3	8	ПК-4-31 ПК-4-В1 ПК-4-В2 ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2Л2.1Л3. 1 Л3.2 Э1 Э2			

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	Экзамен	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-31;ПК-4-У1;ПК-4-32;ПК-4-У2;ПК-4-В2;ПК-4-В1	<p>ВОПРОСЫ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ЭКЗАМЕНУ</p> <p>Теоретические вопросы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Какие существуют ограничения применения машинного обучения в материаловедении. 2. Основные принципы выбора термодинамических баз данных для проведения расчетов. 3. Связь физико-химических свойств с конечными свойствами материалов. 4. Ошибки в области машинного обучения в материаловедении и их способы минимизации. 5. Термодинамические базы данных. Какую информацию содержат термодинамические базы данных. 6. Основные принципы и структура программного обеспечения для термодинамического моделирования и расчетов в области машинного обучения. 7. В каких случаях применяется комбинированный метод машинного обучения. 8. Гомогенность и однородность данных для машинного обучения в области термодинамики. 9. Численные методы поиска гетерофазного равновесия. Задача условного и безусловного поиска экстремума. Метод множителей Лагранжа. Метод выпуклых оболочек. 10. Нелинейная регрессия. Качественные и количественные оценки моделей. Маржинальные и совместные доверительные интервалы. и проверка статистических гипотез. Тест Фишера. <p>Практические вопросы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Вывод термодинамических данных с использованием функций. 2. Построение фазовых диаграмм различных системы с использованием функций. 3. Расчет энтальпии и энтропии смешения с использованием функций. 4. Моделирование термофизических свойств с использованием ПО. 5. Моделирование термодинамических свойств с использованием ПО.
-----	---------	--	---

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	Самостоятельная работа №1	ОПК-1-У1;ОПК-1-31;ОПК-1-В1	Введение в расчетную термодинамику
P2	Самостоятельная работа № 2	ОПК-1-31;ОПК-1-В1;ПК-4-31;ПК-4-У1	Модели растворов
P3	Самостоятельная работа №3	ОПК-1-31;ОПК-1-В1;ОПК-1-У1;ПК-4-31;ПК-4-У1	Критический анализ данных
P4	Практическая работа № 1	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-У1	Расчет термодинамических свойств в однокомпонентной систем
P5	Самостоятельная работа №4	ОПК-1-31;ОПК-1-В1;ОПК-1-У1;ПК-4-31;ПК-4-У1;ПК-4-32	Расчет термодинамических свойств в однокомпонентной системе
P6	Практическая работа № 2	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-У1;ПК-4-В1	Расчет параметров смешения в двухкомпонентной системе
P7	Самостоятельная работа №5	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-У1;ПК-4-В1	Расчет параметров смешения в двухкомпонентной системе
P8	Практическая работа № 3	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-У1;ПК-4-В1	Расчет фазовых диаграмм и свойств сплавов в двухкомпонентной системе
P9	Самостоятельная работа №6	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ПК-4-У1;ПК-4-В1	Расчет фазовых диаграмм и свойств сплавов в двухкомпонентной системе

P10	Самостоятельная работа №7	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ПК-4-У1;ПК-4-У2;ПК-4-В1;ПК-4-31	Моделирование свойств расплавов
P11	Практическая работа № 4	ОПК-1-У1;ПК-4-У1;ПК-4-В1;ПК-4-В2;ПК-4-У2	Применение физических моделей для описания термофизических свойств
P12	Самостоятельная работа №8	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-31;ПК-4-У1;ПК-4-У2;ПК-4-В1;ПК-4-В2	Применение физических моделей для описания термофизических свойств
P13	Самостоятельная работа №9	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-31;ПК-4-У1;ПК-4-У2;ПК-4-В1;ПК-4-В2	Связь структуры и свойств в промышленных материалах
P14	Самостоятельная работа № 10	ОПК-1-31;ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ПК-4-31;ПК-4-В1;ПК-4-В2	Методы оптимизации термодинамических свойств

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)

Обучающийся для получения зачета должен выполнить все работы, указанные в данном разделе.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Агеев Е. П.	Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах: в вопросах и ответах: учебное пособие	Электронная библиотека	Москва: МЦНМО, 2005
Л1.2	Белов Н. А., Хван А. В.	Основы материаловедения: лаб. практикум: учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по напр. Metallurgy	Электронная библиотека	М.: Изд-во МИСиС, 2009

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	Путилов К. А.	Термодинамика	Электронная библиотека	Москва: Наука, 1971

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л3.1	Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.	Краткий курс физической химии: учебник для металлург. спец. вузов	Библиотека МИСиС	М.: Metallurgy, 1979
Л3.2	Кузнецов Г. М., Барсуков А. Д., Истомина-Кастровский В. В., др. Г. М., Кузнецов	Физика металлов: Разд.: Физические свойства металлов и сплавов: Лаб. практикум для студ. спец. 110500	Библиотека МИСиС	М.: Учеба, 2000

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Описание ПО ThermoCalc	https://www.thermocalc.com/
Э2	Описание ПО MTDATA	http://mtdata-uk.com/

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	ThermoCalc
П.2	MTDATA
П.3	ESET NOD32 Antivirus

П.4	Win Pro 10 32-bit/64-bit
6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных	
И.1	SpringerMaterials (https://materials.springer.com/)
И.2	An Open Quantum Materials Database http://oqmd.org/
И.3	Открытая экспериментальная база данных интерметаллидов tpc.iit.edu/index.php/thermo-database

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
313	Аудитория для проведения лекций, семинаров, для самостоятельной работы студентов:	комплект учебной мебели на 17 рабочих мест, оборудованных персональными компьютерами с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета, проектор, экран, доска
314	Аудитория для самостоятельной работы студентов:	комплект учебной мебели на 7 рабочих мест, доска
Читальный зал №4 (Б)		комплект учебной мебели на 20 рабочих мест, компьютеры с подключением к сети «Интернет» и доступом в электронную информационно-образовательную среду университета

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Дисциплина требует большой 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 опечатки, 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 прочитать весь заданный материал, чтобы составить представление об изучаемом материале, понять общий смысл прочитанного. Затем прочитать вторично, чтобы в ходе чтения понять и запомнить смысл каждой фразы, 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 Еремин В.В., Каргов С.А., Успенская И.А. и др. Основы физической химии. Теория. Т.1., М.: Бином, 2013
- 2 Пригожин И., Дефей Р., Химическая термодинамика. 2-е издание. М.: БИНОМ, 2010.
- 3 Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007
- 4 Романовский Б.В. Основы химической кинетики. М.: Экзамен, 2006
- 5 Воронин Г.Ф., Основы термодинамики. М: МГУ, 1987 Мюнстер А. Химическая термодинамика. М: Мир, 1971