

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

 Е.А. Турилова

28 февраля 2025 г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Информационные технологии и методы искусственного интеллекта в материаловедении

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика перспективных материалов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и): заведующий кафедрой, д.н. Мокшин А.В. (кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов, Отделение физики), Anatolii.Mokshin@kpfu.ru ; доцент, к.н. Файрушин И.И. (кафедра вычислительной физики и моделирования физических процессов, Отделение физики), IFajrushin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-3	Способен применять знания в области информационных технологий, использовать современные компьютерные сети, программные продукты и ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет" (далее - сеть "Интернет") для решения задач профессиональной деятельности, в том числе находящихся за пределами профильной подготовки

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные этапы развития вычислительной техники и программного обеспечения;
- базовые принципы использования современных информационных технологий в физике и компьютерной техники в профессиональной деятельности;
- основы работы в специализированных программных пакетах.

Должен уметь:

- использовать математический аппарат и информационные технологии при решении прикладных задач.

Должен владеть:

- методами поиска и обработки информации с применением современных информационных технологий;
- навыками применения информационных технологий при решении прикладных задач.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные знания на практике

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.О.04 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 03.04.02 "Физика (Физика перспективных материалов)" и относится к обязательной части ОПОП ВО.

Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 32 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 14 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 40 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 семестре.

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

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Се-местр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)						Само-стоя-тельная ра-бота
			Лекции, всего	Лекции в эл. форме	Практи-ческие занятия, всего	Практи-ческие в эл. форме	Лабора-торные работы, всего	Лабора-торные в эл. форме	
1.	Тема 1. Введение в информационные технологии в физике	1	2	0	0	0	0	0	4
2.	Тема 2. Молекулярное моделирование в физике	1	2	0	2	0	0	0	4
3.	Тема 3. Введение в облачные вычисления	1	2	0	2	0	0	0	4
4.	Тема 4. Технологии искусственного интеллекта	1	2	0	2	0	0	0	4
5.	Тема 5. Методы машинного обучения	1	2	0	2	0	0	0	6
6.	Тема 6. Методы понижения размерности и матричные разложения	1	2	0	0	0	0	0	6
7.	Тема 7. Основы программирования на языке Python	1	2	0	2	0	0	0	4
8.	Тема 8. Основные библиотеки для работы с алгоритмами машинного обучения на языке программирования Python	1	2	0	2	0	0	0	4
4.2	Содержание дисциплины (модуля) в языке программирования Python	1	2	0	2	0	0	0	4

Введение в информационные технологии в физике: определение, принципы и инструментарий. Обеспечение ИТ. Этапы развития ИТ. Знакомство с основными этапами развития вычислительной техники. Основные этапы развития аппаратного и программного обеспечения. Анализ современных тенденций развития аппаратного обеспечения, приведших к появлению технологий облачных вычислений. Рост производительности компьютеров. Появление многопроцессорных и многоядерных вычислительных систем, развитие блейд-систем. Появление систем и сетей хранения данных. Консолидация инфраструктуры

Тема 2. Тема 2. Молекулярное моделирование в физике

Методы компьютерного моделирования в физике. Основы моделирования молекулярной динамики (алгоритмы; трюки, ускоряющие расчеты). Потенциалы межмолекулярного взаимодействия. Методы классического и квантово-механического молекулярно-динамического моделирования (детерменистические методы). Монте-Карло методы (стохастические методы). Программные комплексы по моделированию классической молекулярной динамики: Lammmps, Tinker, NAMD. Программные пакеты по квантово-механическому моделированию: VASP, Quantum-Espresso, CPMD.

Тема 3. Тема 3. Введение в облачные вычисления

Базовые сведения о появлении, развитии и использовании технологий облачных вычислений. Обзор парадигмы облачных вычислений, Архитектура облачных систем. Модели развёртывания облаков: частное облако, публичное облако, гибридное облако, общественное облако. Основные модели предоставления услуг облачных вычислений: Software as a Service (SaaS) (ПО-как-услуга), Platform as a Service (PaaS), Инфраструктура как сервис (Infrastructure as a Service, IaaS), другие облачные сервисы (XaaS). Различия между облачными и кластерными (распределенными, или - Gridтехнологиями) вычислениями.

Тема 4. Тема 4. Технологии искусственного интеллекта

Технологии искусственного интеллекта. Основные направления ИИ. Практические сферы применения. Основные разновидности интеллектуальных систем. Информационные технологии поддержки принятия решений (ИТППР). Отличительные характеристики ИТППР. Структура системы поддержки принятия решений (база данных, база моделей и их классификация, система управления интерфейсом). Экспертные системы. Основные компоненты ИТ экспертных систем. Классификация ЭС по решаемой задаче. Классификация ЭС по связи с реальным временем. Этапы разработки ЭС. Примеры ЭС.

Тема 5. Методы машинного обучения

Введение в машинное обучение в физике. Базовые понятия машинного обучения. Основные инструменты машинного обучения. Визуализация данных. Математические модели и методы. Методы машинного обучения. Алгоритм распознавания. Методы обучения: машинное обучение с учителем, машинное обучение без учителя, оценка качества модели. Введение в нейронные сети. Базовые понятия и определения нейронных сетей. Базовые архитектуры нейронных сетей. Алгоритмы машинного обучения. Эволюционное моделирование (ЭМ). Назначение и области применения ЭМ. Соответствие терминов эволюционной и математической моделей. Концепция и принципы ЭМ. Методы эволюционного моделирования. Генетический алгоритм.

Тема 6. Методы понижения размерности и матричные разложения

Методы понижения размерности и матричные разложения. Переход в признаковое пространство меньшей размерности. Отбор наиболее важных признаков и создание новых на основе исходных. Метод главных компонент. Матричные разложения как способ понижения размерности и восстановления пропущенных значений в матрицах и построения рекомендательных систем.

Тема 7. Основы программирования на языке Python

Базовые принципы языка Python (модель данных, объекты, функции и стек вызовов, пространства имен и области видимости, классы и их наследование и т.д.). Стандартные средства языка Python (ошибки и исключения, модули и импорт, итераторы и генераторы, работа с файловой системой и файлами, работа с функциями `functool` и лямбда функции и т.д.).

Тема 8. Основные библиотеки для работы с алгоритмами машинного обучения на языке программирования Python

Основные библиотеки для работы с алгоритмами машинного обучения на языке программирования Python. Обзор библиотек: TensorFlow, PyTorch, SKlearn, Matplotlib, Scipy, Pandas и пр. Решение некоторых примерных задач с помощью данных библиотек. Matplotlib - библиотека на языке программирования Python для визуализации данных двумерной графикой.

Тема 9. Анализ больших данных на языке программирования Python

Анализ больших данных на языке программирования Python. Обучение анализу больших данных (работа с Data Science, создание на языке Python запросов SQL, написание кодов для работы с базами данных MySQL и Oracle). Разработка собственных подпрограмм-функций и модулей для работы с большими базами данных.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 6 апреля 2021 года №245)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-99бин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	<p>Подготовка к практическим работам. Студент обязан перед выполнением каждой практической работы самостоятельно ознакомиться с теоретическим материалом и по ее результатам предоставить отчет. Перед выполнением практической работы требуется получить вариант задания. Далее необходимо ознакомиться с заданием. Выполнение практической работы следует начать с изучения теоретических сведений. Результаты работы необходимо оформить в виде отчета.</p> <p>Практическая работа считается выполненной, если предоставлен отчет о результатах выполнения задания и проведена защита проделанной работы.</p> <p>Защита проводится в два этапа:</p> <p>1) Демонстрируются результаты выполнения задания. В случае практической работы, предусматривающей разработку программного приложения при помощи тестового примера доказывається, что результат, получаемый при выполнении программы правильный.</p> <p>2) Необходимо ответить на ряд вопросов преподавателя, которые должны прояснить степень самостоятельности и понимания выполнения данной работы.</p> <p>Вариант задания выдается преподавателем, проводящим практические занятия, он же принимает практическую работу. Каждая практическая работа оценивается определенным количеством баллов в соответствии с регламентом балльно-рейтинговой системы</p> <p>Каждый отчет должен содержать: 1. Заголовок практической работы (название и цель работы). 2. Задание к практической работе. 3. Краткие теоретические сведения. 4. Описание последовательности действий, произведенных при выполнении работы (ход работы). 5. Результаты выполнения практической работы (в электронном варианте или распечатанные).</p> <p>Крайне желательно, сделать все задачи. В обратном случае, трудно будет рассчитывать на высокую оценку. Компьютерные задания засчитываются по полной, если они сделаны самостоятельно и обрабатывают без замечаний на компьютерах преподавателя.</p>
самостоятельная работа	<p>Самостоятельное изучение части материала. Если часть учебного материала отведена на самостоятельное изучение, то необходимо приступить к этому незамедлительно после указания преподавателя и освоить материал в отведенные им сроки. Материал следует изучить по доступным письменным и электронным источникам, о которых сообщит преподаватель, и информация о которых содержится в учебном плане.</p>
зачет	<p>Обучающийся по материалам лекций, основной и дополнительной литературы должен всесторонне и систематически изучить вопросы, выносимые на зачет. Он также обязан изучить учебно-программный материал и уметь свободно выполнять задания, предусмотренные программой, усвоить взаимосвязь основных понятий дисциплины в их значении для приобретаемой профессии, проявить творческие способности в понимании, изложении и использовании учебно-программного материала.</p>

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

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 03.04.02 "Физика" и магистерской программе "Физика перспективных материалов".

*Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.О.04 Информационные технологии и методы искусственного
интеллекта в материаловедении*

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика перспективных материалов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Основная литература:

1. Уколов, А. И. Информационные технологии : учебное пособие / А. И. Уколов. - Керчь : КГМТУ, 2020. - 76 с. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/157005> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Скитер, Н. Н. Информационные технологии : учебное пособие / Н. Н. Скитер, А. В. Костикова, Ю. А. Сайкина. - Волгоград : ВолгГТУ, 2019. - 96 с. - ISBN 978-5-9948-3203-5. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/157200> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Жук, Ю. А. Информационные технологии: мультимедиа : учебное пособие для вузов / Ю. А. Жук. - 3-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2021. - 208 с. - ISBN 978-5-8114-6683-2. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/151663> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература:

1. Полупанов, Д. В. Программирование в Python 3 : учебное пособие / Д. В. Полупанов, С. Р. Абдюшева, А. М. Ефимов. - Уфа : БашГУ, 2020. - 164 с. - ISBN 978-5-7477-5230-6. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/179915> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Широбокова, С. Н. Программирование на языке Python для лабораторных занятий : учебное пособие / С. Н. Широбокова, А. А. Кацупеев, А. В. Сулыз. - Новочеркасск : ЮРГПУ, 2020. - 104 с. - ISBN 978-5-9997-0725-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180938> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Косицин, Д. Ю. Язык программирования Python : учебно-методическое пособие / Д. Ю. Косицин. - Минск : БГУ, 2019. - 136 с. - ISBN 978-985-566-746-0. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/180546> (дата обращения: 18.03.2025). - Режим доступа: для авториз. пользователей.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.О.04 Информационные технологии и методы искусственного
интеллекта в материаловедении

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 03.04.02 - Физика

Профиль подготовки: Физика перспективных материалов

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2025

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.