

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ БИОМЕДИЦИНЫ
КАФЕДРА ЛАЗЕРНЫХ МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

ОДОБРЕНО НТС ИФИБ

Протокол № 3.1

от 30.08.2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В
СПЕКТРОСКОПИИ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.04.02 Физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
2	3	108	15	30	0		27	0	Э
Итого	3	108	15	30	0	30	27	0	

АННОТАЦИЯ

Целью освоения учебной дисциплины «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» является формирование у студентов знаний о методах постобработки спектральных данных (в частности, спектров поглощения, флуоресценции, диффузного отражения), а также статистическом анализе определяемых по спектральным зависимостям характеристик. Также курс включает в себя основы машинного обучения. Магистрант должен в результате прохождения курса уметь проводить постобработку спектров с целью повышения дешифровочных свойств полученных *in vivo* спектров, осуществлять декомпозицию спектров флуоресценции, поглощения и диффузного отражения на компоненты и вычисление на их основе набора характеристик, использовать различные инструменты математической статистики для описания наборов данных, получаемых в результате спектрального анализа, обнаружения статистически значимых различий между экспериментальными группами, классификации полученных данных с помощью методов машинного обучения.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения учебной дисциплины «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» является формирование у студентов знаний о методах постобработки спектральных данных (в частности, спектров поглощения, флуоресценции, диффузного отражения), а также статистическом анализе определяемых по спектральным зависимостям характеристик. Также курс включает в себя основы машинного обучения. Магистрант должен в результате прохождения курса уметь проводить постобработку спектров с целью повышения дешифровочных свойств полученных *in vivo* спектров, осуществлять декомпозицию спектров флуоресценции, поглощения и диффузного отражения на компоненты и вычисление на их основе набора характеристик, использовать различные инструменты математической статистики для описания наборов данных, получаемых в результате спектрального анализа, обнаружения статистически значимых различий между экспериментальными группами, классификации полученных данных с помощью методов машинного обучения.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Содержание программы «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» имеет междисциплинарный характер и затрагивает такие области знания как оптика, спектроскопия, физика твердого тела, биология, физиология, коллоидная химия и нанотехнологии.

Программа настоящей дисциплины может быть использована как в рамках магистерской программы «Биомедицинская фотоника», так и в рамках курсов повышения квалификации для медицинских физиков, инженеров медицинской техники и специалистов в области медицинских приложений нанотехнологий.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
Проводить научные исследования в области взаимодействия оптического излучения с биологическими тканями, в том числе, содержащими фотосенсибилизаторы	Биологические ткани, в том числе, содержащие фотосенсибилизаторы	ПК-5.5 [1] - Способен рассчитывать распространение света в биологических тканях с применением специализированных компьютерных программ <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	З-ПК-5.5[1] - Знать закономерности распространения света в рассеивающих и поглощающих средах; уравнения Максвелла; решение Ми для уравнений Максвелла при рассеянии света на сферических частицах; приближение Рэлея для описания рассеяния; решение уравнений Максвелла для рассеяния на цилиндрических частицах; оптические спектры поглощения биологических молекул; тепловые эффекты оптического излучения, закон диффузии излучения и тепла; механизм возникновения флуоресценции; механизмы физиологического действия фотодинамической терапии; механизмы

			<p>физиологического действия гипертермии; У-ПК-5.5[1] - уметь рассчитывать распространение света в биологических тканях с помощью численных и аналитических методов; учитывать влияние поглощения, многократного рассеяния и геометрии измерения на результаты измерения оптических спектров и изображений; осуществлять математическое планирование фотодинамического воздействия; восстанавливать информацию об оптических свойствах биологических тканей по результатам спектроскопических измерений; В-ПК-5.5[1] - владеть навыком моделирования распространения света в биологических тканях численными и аналитическими методами</p>
<p>Проводить научные исследования в области взаимодействия оптического излучения с биологическими тканями, в том числе, содержащими</p>	<p>Биологические ткани, в том числе, содержащие фотосенсибилизаторы</p>	<p>ПК-5.7 [1] - Способен разрабатывать алгоритмы и пользоваться математическим аппаратом для обработки спектральной и видеофлуоресцентной</p>	<p>З-ПК-5.7[1] - Знать методы разложения спектров диффузного отражения; методы разложения спектров флуоресценции; методы описательной статистики;</p>

фотосенсибилизаторы		<p>информации</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011</p>	<p>параметрические методы математической статистики для проверки гипотез; непараметрические методы математической статистики для проверки гипотез; методы кластерного анализа; методы классификации данных с учителем; У-ПК-5.7[1] - Уметь дешифровать спектры флуоресценции; дешифровать спектры диффузного отражения; описывать полученные наборы данных с помощью статистики; осуществлять проверку типа распределения полученного набора данных; пользоваться параметрическими методами математической статистики для обнаружения статистически значимых различий; пользоваться непараметрическими методами математической статистики для обнаружения статистически значимых различий; В-ПК-5.7[1] - Владеть навыками постобработки и расшифровки спектров флуоресценции и</p>
---------------------	--	--	--

			диффузного отражения; статистического анализа и классификации данных, полученных методом оптической спектроскопии
Проводить научные исследования в области взаимодействия оптического излучения с биологическими тканями, в том числе, содержащими фотосенсибилизаторы	Биологические ткани, в том числе, содержащие фотосенсибилизаторы	<p>ПК-1 [1] - Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011</p>	<p>З-ПК-1[1] - знать методы проведения научных исследований и выполнения опытно-конструкторских работ в области физики ;</p> <p>У-ПК-1[1] - уметь самостоятельно формулировать цели, ставить задачи научных исследований в своей профессиональной сфере; решать физические задачи с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта;</p> <p>В-ПК-1[1] - владеть навыками работы на современной аппаратуре, оборудовании; навыками использования информационных технологий в своей профессиональной области</p>

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары)/ Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>2 Семестр</i>						
1	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями	1-5	5/10/0	Т-2 (10)	15	ДЗ-5	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-5.5, У-ПК-5.5, В-ПК-5.5
2	Статистический анализ данных, вычисляемых по спектрам флуоресценции, диффузного отражения и поглощения	6-10	5/10/0	ДЗ-10 (15)	15	ДЗ-10	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-5.7, У-ПК-5.7, В-ПК-5.7
3	Методы машинного обучения в спектроскопии	11-15	5/10/0	ДЗ-15 (20)	20	ДЗ-15	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-5.7, У-ПК-5.7, В-ПК-5.7
	<i>Итого за 2 Семестр</i>		15/30/0		50		
	Контрольные мероприятия за 2 Семестр				50	Э	3-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-5.5, У-ПК-5.5, В-ПК-5.5, 3-ПК-5.7, У-ПК-5.7, В-ПК-5.7

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
Т	Тестирование
ДЗ	Домашнее задание
Э	Экзамен

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>2 Семестр</i>	15	30	0
1-5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями	5	10	0
1 - 5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями Теоритическое описание распространения света в тканях, приближенные модели, численное моделирование, оптические свойства, измеряемые величины, решение обратной задачи	Всего аудиторных часов		
		5	10	0
		Онлайн		
		5	0	0
6-10	Статистический анализ данных, вычисляемых по спектрам флуоресценции, диффузного отражения и поглощения	5	10	0
6 - 7	Методы описательной статистики, дисперсионный анализ Методы описательной статистики, проверка распределения данных на нормальность, дисперсионный анализ данных, полученных в результате спектрального анализа	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		2	0	0
8	Параметрические методы анализа Критерий Стьюдента, анализ повторных измерений, поправка на множественность сравнений	Всего аудиторных часов		
		1	2	0
		Онлайн		
		1	0	0
9 - 10	Непараметрические методы анализа Качественные и порядковые переменные, анализ долей, поправка на непрерывность, таблицы сопряженности, точный критерий Фишера, критерий Мак-Нимара, критерий Манна-Уитни, Уилкоксона, Крускала-Уоллиса, Фридмана	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		2	0	0
11-15	Методы машинного обучения в спектроскопии	5	10	0
11 - 12	Методы понижения размерности, кластерного анализа, восстановления пропусков в данных Методы понижения размерности (фильтрация и проекции, с учителем и без), кластерного анализа (четкие и нечеткие), восстановления пропусков в данных	Всего аудиторных часов		
		2	4	0
		Онлайн		
		2	0	0
13 - 15	Методы машинного обучения с учителем типы входных данных и откликов, системы подкрепления с управлением по реакции и по стимулам, линейная регрессия, логистическая регрессия, наивный байес, линейный дискриминантный анализ, деревья решений, алгоритм k-ближайшего соседа.	Всего аудиторных часов		
		3	6	0
		Онлайн		
		3	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции

ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

Недели	Темы занятий / Содержание
	<i>2 Семестр</i>
1 - 5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями Решения диффузионного приближения теории переноса излучения, метод Кубелки-Мунка, метод Монте-Карло, метод удвоения-добавления
6 - 10	Методы математической статистики применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python Методы математической статистики применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python
11 - 15	Методы машинного обучения применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python Методы машинного обучения применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашнего задания, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем. Также во время занятий используются технические средства.

Для выполнения задач по обработке спектральных данных и статистическому анализу используется язык Python.

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-1	З-ПК-1	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	У-ПК-1	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	В-ПК-1	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
ПК-5.5	З-ПК-5.5	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	У-ПК-5.5	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	В-ПК-5.5	Э, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15

ПК-5.7	З-ПК-5.7	Э, ДЗ-10, ДЗ-15, Т-2
	У-ПК-5.7	Э, ДЗ-10, ДЗ-15, Т-2
	В-ПК-5.7	Э, ДЗ-10, ДЗ-15, Т-2

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – «хорошо»	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 – «удовлетворительно»	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64			
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. И S34 Optical spectroscopy in chemistry and life sciences : , Schmidt W., Weinheim: Wiley-VCH, 2005
2. ЭИ В49 Python Recipes Handbook : A Problem-Solution Approach, Bernard, Joey. , Berkeley, CA: Apress, 2016
3. ЭИ Р 28 Python и машинное обучение: крайне необходимое пособие по новейшей предсказательной аналитике, обязательное для более глубокого понимания методологии машинного обучения : , Рашка С. , Москва: ДМК Пресс, 2017
4. ЭИ Л 14 Наглядная математическая статистика : учебное пособие, Лагутин М. Б., Москва: Лаборатория знаний, 2019
5. 004 С 36 Основы Data Science и Big Data. Python и наука о данных : , Силен Д., Мейсман А., Али М., Санкт-Петербург: Питер, 2020

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашних заданий, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем.

На протяжении семестра студенту необходимо сделать 4 самостоятельных работы: №1 - тест по анализу спектров флуоресценции (максимум 10 баллов), №2 - домашнее задание по декомпозиции спектров флуоресценции и/или диффузного отражения (максимум 10 баллов), №3 - домашнее задание по статистической обработке данных (максимум 20 баллов), №4 – тест по классификации данных (максимум 10 баллов).

По итогам прохождения курса студенты должны пройти экзамен. В каждый билет будет включен один теоретический вопрос и одна задача, которую можно решить без использования вычислительных систем.

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашних заданий, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем.

На протяжении семестра студенту необходимо сделать 4 самостоятельных работы: №1 - тест по анализу спектров флуоресценции (максимум 10 баллов), №2 - домашнее задание по декомпозиции спектров флуоресценции и/или диффузного отражения (максимум 10 баллов), №3 - домашнее задание по статистической обработке данных (максимум 20 баллов), №4 – тест по классификации данных (максимум 10 баллов).

По итогам прохождения курса студенты должны пройти экзамен. В каждый билет будет включен один теоретический вопрос и одна задача, которую можно решить без использования вычислительных систем.

Автор(ы):

Савельева Татьяна Александровна, к.ф.-м.н.