

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце: Ханты-Мансийского автономного округа-Югры
ФИО: Косенок Сергей Михайлович "Сургутский государственный университет"
Должность: ректор
Дата подписания: 22.06.2024 08:54:36
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

13 июня 2024г., протокол УМС №5

DataScience в химии

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**
Учебный план b040301-Инфохим-24-1.plx
04.03.01 ХИМИЯ
Направленность (профиль): Инфохимия

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **2 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 72
в том числе:
аудиторные занятия 48
самостоятельная работа 24

Виды контроля в семестрах:
зачеты 7

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
Неделя	17 2/6			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	32	32	3	32
Практические	16	16	1	16
Итого ауд.	48	48	4	48
Контактная работа	48	48	4	48
Сам. работа	24	24	2	24
Итого	72	72	7	72

Программу составил(и):

к.ф.-м.н., Доцент, Шуваев А.Н.

Рабочая программа дисциплины

DataScience в химии

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 г. № 671)

составлена на основании учебного плана:

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль): Инфохимия

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 13.06.2024 протокол № 5.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд. биол. наук, Сутормин Олег Сергеевич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Целью изучения дисциплины является обучение студентов использованию анализа данных для решения статистических задач в применении в химических науках. В частности, акцент сделан на использование исторических данных для построения релевантной модели и установления важного тренда развития.
1.2	Данный курс необходим для научно-исследовательской работы студентов по направлению бакалаврской программы. Также данный курс играет важную роль в формировании творческого инженерного мышления специалиста любого профиля, подготовки общетеоретической базы для прикладных и профилирующих дисциплин.
1.4	Задачи изучения дисциплины:
1.5	Задачей курса является обучение современным нетривиальным методам анализа данных.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.В.ДВ.03
2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Математическое моделирование химических процессов
2.1.2	Применение информационно-коммуникационных технологий в науке и образовании
2.1.3	Математический анализ
2.1.4	Математика и основы статистики для химиков
2.1.5	Цифровая грамотность
2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Анализ природных и техногенных объектов
2.2.2	Коллоидная химия
2.2.3	Основы промышленного анализа
2.2.4	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ПК-1.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике химической направленности, формулирует выводы по результатам их анализа

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1 Знать:	
3.1.1	современные информационные технологии для обработки, анализа и обобщения отечественного и международного опыта;
3.1.2	современные языки программирования для адаптации алгоритмов машинного к задачам, сформированным тематикой научного исследования.
3.2 Уметь:	
3.2.1	применять современные информационные технологии для обработки, анализа и обобщения отечественного и международного опыта по тематике научного исследования;
3.2.2	применять современные языки программирования для адаптации алгоритмов машинного обучения к задачам, сформированным тематикой научного исследования.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Примечание
	Раздел 1. Статистические модели					
1.1	Типы предсказательных моделей Модели принятия решений Прогноз тренда Машинное обучение: Random Forest /Лек/	7	8	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

1.2	2. Инкрементальное моделирование Классические модели декомпозиции /Пр/	7	4	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
1.3	/Ср/	7	8	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 2. Набор					
2.1	Машинное обучение: Random Forest Машинное обучение: нейросетевое моделирование /Лек/	7	8	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.2	Моделирование в парадигме Random Forest Практика по нейросетевому моделированию /Пр/	7	4	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.3	/Ср/	7	8	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 3. Прогноз					
3.1	Непараметрическое предсказание Современное прогнозирование Совмещенные методы /Лек/	7	16	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
3.2	Метод чёрного ящика Оценка моделей Прогнозирование пространственно- временных данных /Пр/	7	8	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
3.3	/Ср/	7	6	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4
3.4	/Зачёт/	7	2	ПК-1.1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5Л2.1 Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

5.1. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации

Представлены отдельным документом

5.2. Оценочные материалы для диагностического тестирования

Представлены отдельным документом

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
---------------------	----------	-------------------	----------

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Мендель А. В.	Модели принятия решений: Учебное пособие	Москва: ЮНИТИ-ДАНА, 2012, Электронный ресурс	1
Л1.2	Громов Н. В., Таран О. П.	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа. Сборник задач с основами теории и примерами решений: Учебное пособие	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет, 2018, Электронный ресурс	1
Л1.3	Рябошапко Б.В.	Модели принятия решений при проектировании систем сбора данных: Учебное пособие	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета (ЮФУ), 2019, Электронный ресурс	1
Л1.4	Малахова Ю. Н., Григорьев Т. Е., Чвалун С. Н.	Информационные технологии в химии полимеров: учебно-методическое пособие	Москва: РТУ МИРЭА, 2022, Электронный ресурс	1
Л1.5	Евстафьев В.А., Тюков М.А.	Искусственный интеллект и нейросети: практика применения в рекламе: Учебное пособие	Москва: Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2023, Электронный ресурс	1

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Тамбовский И. В.	Информационные технологии в химии: методические указания к выполнению самостоятельной работы	Кострома: КГУ им. Н.А. Некрасова, 2020, Электронный ресурс	1
Л2.2	Цукалос М.	Golang для профи: работа с сетью, многопоточность, структуры данных и машинное обучение с Go: Практическое пособие	Санкт-Петербург: Питер, 2021, Электронный ресурс	1

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Scopus (https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic#basic)
Э2	РИНЦ (https://elibrary.ru/defaultx.asp?)
Э3	PubMed Central (http://publicaccess.nih.gov/index.htm)
Э4	Система SourceForge (http://sourceforge.net/)

6.3.1 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, пакет прикладных программ Microsoft Office
---------	--

6.3.2 Перечень информационных справочных систем

6.3.2.1	Национальная электронная библиотека - нэб.рф;
6.3.2.2	Электронные книги Springer Nature (Science, Technology and Medicine Collections) - https://link.springer.com/ ;
6.3.2.3	Гарант-информационно-правовой портал - http://www.garant.ru/ ;
6.3.2.4	КонсультантПлюс - надежная правовая поддержка - http://www.consultant.ru

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: типовой учебной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.
-----	---