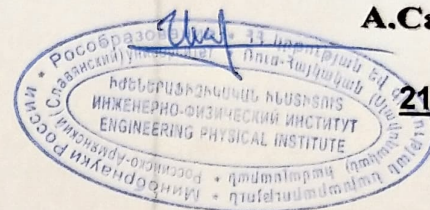


**ГОУ ВПО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ)
УНИВЕРСИТЕТ**

Составлен в соответствии с государственными требованиями к минимуму содержания и уровню подготовки выпускников по направлению 11.04.04 – Электроника и нанoeлектроника и Положением «Об УМКД РАУ».

УТВЕРЖДАЮ:

**Директор института
А.Саркисян**



21.07.2023

Инженерно-физический институт

Кафедра технологии материалов и структур электронной техники

Автор: д.ф.-м.н., и.о. профессор Мамасакхисов Евгений Шамильевич

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

Дисциплина: Б1.0.07 «Методы машинного обучения в материаловедении»

Направление: 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника»

ЕРЕВАН 2023

1. Аннотация

В рамках дисциплины «Методы машинного обучения в материаловедении» изучаются основы современных методов машинного обучения (МО), используемых при исследовании материалов, а также даются представления о различных таких материалах.

Цель преподавания дисциплин:

Целью изучения дисциплины является подготовка высококвалифицированных специалистов, владеющих теоретическими знаниями и практическими навыками в области исследования механических, электронных и прочих свойств материалов, включая органические и неорганические кристаллы, полимерные материалы, углеродные нанотрубки и т. д. методами машинного обучения, и способных на основе полученных знаний к активной творческой работе в области технической физики и нанотехнологий как в научно-исследовательских учреждениях, так и в условиях промышленного производства.

Учебная задача: Задачи курса состоят в изложении основных понятий, необходимых для описания и последующего моделирования физических процессов, протекающих в различных материалах, методами машинного обучения.

Основные методы проведения занятий. лекции, проработки.

Список литературы: содержит ?? наименования книг и монографий отечественных и зарубежных авторов, ?? научных статьи; этот список поможет студентам освоить и создать свой профессиональный исследовательский инструментарий, обеспечить целостность обучения.

Краткое содержание курса: Основные методы понижения размерности данных. Обучение «с учителем» и «без». Искусственные нейронные сети. Основы глубокого обучения. Критерии оценки. Алгоритмы оптимизации. Применение алгоритмов МО к задачам материаловедения.

2. Требования к исходным уровням знаний и умений студентов

Основы линейной алгебры. Квантовая механика, статистическая физика и термодинамика. Базовые навыки в программировании на языке Python.

3. Цель и задачи дисциплины

Основная цель изучаемой дисциплины — ознакомление студентов с основными методами МО и подходами к предсказанию различных физических свойств материалов с их помощью.

4. Требования к уровню освоения содержания дисциплины

В результате изучения дисциплины студент должен:

- 1) знать новейшие достижения в области МО;
- 2) знать основные принципы, на которых основаны методы МО
- 3) уметь взаимодействовать со специалистами в других предметных областях, осуществлять поиск научно-технической и образовательной информации;
- 4) владеть интерпретацией результатов научного исследования, методологией научных исследований;
- 5) уметь применять физические принципы и явления для решения прикладных задач;
- 6) владеть методами интерпретации результатов, полученных в результате применения методов МО.

5. Трудоемкости дисциплины и видов учебной работы по учебному плану

Виды учебной работы	Всего (ак. час)
<i>Общая трудоемкость изучения дисциплины, в т.ч.:</i>	52
1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	52
1.1. Лекционные занятия	18
1.2. Семинарские занятия	-
1.3. Практические занятия	34
1.4. Лабораторные работы	-
2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	
2.1. Контактная самостоятельная работа	
2.2. Бесконтактная самостоятельная работа	-
<i>Итоговый контроль</i>	<i>Экзамен</i>

6. Распределение весов по формам контроля

Веса и формы контролей	Вес форм текущих контролей в результирующей оценке текущего контроля	Вес форм промежуточных контролей и результирующей оценки текущего контроля в итоговой оценке промежуточного контроля	Вес итоговых оценок промежуточных контролей в результирующей оценке промежуточного контроля	Вес результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля						
				М1	М2	М3	М1	М2	М3	
Вид учебной работы/ контроля	М1	М2	М3	М1	М2	М3				
Контрольная работа	0	0	1	0	0	1				
Тест										
Курсовая работа										
Лабораторные работы										
Письменные домашние задания										
Эссе										
Семинар										
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках соответствующих промежуточных контролей		0	0	0						

Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		0	
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		0	
Вес итоговой оценки 3-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		1	
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля		0.4	

Вес оценки экзамена/зачета в результирующей оценке итогового контроля	0.6							
	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 0$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$	$\Sigma = 1$

7. Содержание дисциплины

7.1 Тематический план и трудоемкости аудиторных занятий

Разделы и темы дисциплины	Всего (ак. часов)	Лекционные занятия (ак. часов)	Семинарские занятия (ак. часов)	Практические занятия (ак. часов)	Лабораторные работы (ак. часов)
1	2	3	4	5	6
МОДУЛЬ 1. МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ	54	18		36	-
Введение	1	1	-	-	-
<u>Раздел 1. Вероятность и случайные процессы</u>	5	3		2	-
<i>Тема 1.1. Вероятность и теорема Байеса</i>	1	1		-	-
<i>Тема 1.2. Типы случайных процессов</i>	1	1		-	-
<i>Тема 1.3. Основные свойства марковских процессов</i>	3	1		2	
<u>Раздел 2. Основные подходы к машинному обучению</u>	11	3		8	-
<i>Тема 2.1. МО «с учителем»</i>	5	1		4	-
<i>Тема 2.2. МО «без учителя»</i>	5	1		4	-
<i>Тема 2.3. Обучение с подкреплением</i>	1	1			
<u>Раздел 3. Методы понижения размерности</u>	6	2		4	

<i>Тема 3.1. Метод главных компонент</i>	3	1		2	
<i>Тема 3.2. Метод стохастического вложения соседей с t-распределением</i>	3	1		2	
<u>Раздел 4. Глубокое обучение</u>	15	5		10	-
<i>Тема 4.1. Искусственные нейронные сети (НС) прямого распространения</i>	6	2		4	-
<i>Тема 4.2. Обратное распространение ошибки</i>	3	1		2	-
<i>Тема 4.3. Конволюционные нейронные сети</i>	6	2		4	
<i>Тема 4.4. Основные алгоритмы оптимизации</i>					
<u>Раздел 5. Основы и приложения теории информации</u>	4	4			-
<i>Тема 5.1. Информационная энтропия и количество информации</i>	2	2		-	-
<i>Тема 5.2. Взаимная энтропия и расхождение Кульбака - Лейблера</i>	2	2		-	-
<u>Раздел 6. Применение методов МО к актуальным задачам материаловедения</u>	10	-		10	
<i>Тема 6.1. Выбор свойств модели, ответственных за свойства материала</i>	4			4	
<i>Тема 6.2. Потенциалы взаимодействия, основанные на МО</i>	4			4	
<i>Тема 6.3. Нейросетевые модели и предсказание свойств материалов</i>	2			2	
ИТОГО	52	18		34	-

7.2 Содержание разделов и тем дисциплины

МОДУЛЬ 1.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Введение

Общие сведения о методах МО в материаловедении. Их значение для фундаментальной и прикладной науки. Области применений.

Раздел 1. Вероятность и случайные процессы

Тема 1.1. Вероятность и теорема Байеса

Основные понятия теории вероятности и математической статистики. Теорема Байеса и ее применение.

Тема 1.2. Типы случайных процессов

Введение понятия случайного процесса для решения физических задач. Основные типы случайных процессов. Свойства процессов Бернулли. Их возможное применение.

Тема 1.3. Основные свойства марковских процессов

Условные вероятности и определение марковского процесса (МП). Уравнение Колмогорова — Чепмена. Основное кинетическое уравнение и принцип детального баланса. МП с непрерывным и дискретным временем.

Раздел 2. Основные подходы к машинному обучению

Тема 2.1. МО «с учителем»

Задачи классификации и регрессии. Вероятностная интерпретация МО «с учителем». Функция потерь.

Тема 2.2. МО «без учителя»

Задачи кластеризации. Алгоритм К — средних. Вероятностная интерпретация МО «без учителя». Шумоподавление. Автокодировщики.

Тема 2.3. Обучение с подкреплением

Марковские процессы принятия решений и обучение с подкреплением.

Раздел 3. Методы понижения размерности

Тема 3.1. Метод главных компонент (PCA)

Сингулярные значения матрицы. PCA как линейное преобразование. Вариация и выделение главных компонент.

Тема 3.2. Метод стохастического вложения соседей с t-распределением

Гауссово распределение. Расхождение Кульбака — Лейблера. Физическая интерпретация.

Раздел 4. Глубокое обучение

Тема 4.1. Искусственные нейронные сети (НС) прямого распространения

Модель искусственного нейрона. Перцептрон. Градиентные методы обучения. Функция активации и функция потерь.

Тема 4.2. Обратное распространение ошибки

Графы вычислений. Дифференцирование сложной функции и алгоритм обратного распространения.

Тема 4.3. Конволюционные нейронные сети

Операция свертки. Мотивация. Пулинг. Эффективные алгоритмы свертки.

Тема 4.4. Основные алгоритмы оптимизации

Метод градиентного спуска. Метод стохастического градиентного спуска. ADAM. RMSProp

Раздел 5. Основы и приложения теории информации

Тема 5.1. Информационная энтропия и количество информации

Количество информации и вероятность события. Информационная энтропия. Максимум энтропии и равновероятные события.

Тема 5.2. Взаимная энтропия и расхождение Кульбака - Лейблера

Расхождение Кульбака — Лейблера как мера близости функций распределения. Вероятностная интерпретация задач МО.

Раздел 6. Применение методов МО к актуальным задачам материаловедения

Тема 6.1. Выбор свойств модели, ответственных за свойства материала

Кулоновская матрица. Структура. Химический состав. Использование методов глубокого обучения.

Тема 6.2. Потенциалы взаимодействия, основанные на МО

MLIP. Потенциалы LAMMPS.

Тема 6.3. Нейросетевые модели и предсказание свойств материалов

Примеры удачного применения моделей нейронных сетей, ранее использовавшихся при исследовании материалов различного происхождения.

7.3 Вопросы

1. Определение марковского процесса
2. Основное уравнение и детальный принцип баланса
3. Описание алгоритма К-средних
4. Персептрон как простейшая нейронная сеть
5. Линейная регрессия и метод наименьших квадратов
6. Оценка максимального правдоподобия
7. Максимальное правдоподобие и расхождение Кульбака — Лейблера
8. Параметры нормального распределения. Одномерный случай
9. Дисперсия случайной величины. Среднеквадратичное отклонение
10. Параметры нормального распределения. Многомерный случай
11. Вероятностная интерпретация контролируемого обучения
12. Вероятностная интерпретация обучения без учителя
13. Что такое ковариация?
14. Центральная предельная теорема.
15. Количество информации и информационная энтропия
16. Условная вероятность и теорема Байеса
17. Плотность вероятности
18. Проблемы классификации и кластеризации
19. Метод Монте-Карло цепи Маркова
20. Анализ основных компонентов

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Рекомендуемая литература

1. Гудфеллоу Я., Бенджио И., Курвилль А. Глубокое обучение. ДМК Пресс, 2018
2. С. М. Bishop. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006
3. J. VanderPlas. Python Data Science Handbook. O'Reily, 2023

8.2. Программные средства освоения дисциплины

Python 3.*

8.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс, проектор

Учебная программа:

Одобрена кафедрой Общей физики и квантовых наноструктур

Зав. кафедрой: Айрапетян Д. Б.

(подпись)