МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Самарский государственный технический университет»
(ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

УТВЕРЖДАЮ:
Первый проректор-проректор по учебной работе
_____ / Д.Е. Овчинников
"_____" _____ 20___ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.01.02 «Машинное обучение и анализ данных»

Код и направление подготовки (специальность)	04.03.01 Химия
Направленность (профиль)	Аналитическая химия
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная
Год начала подготовки	2025
Институт / факультет	Химико-технологический факультет
Выпускающая кафедра	кафедра "Аналитическая и физическая химия"
Кафедра-разработчик	кафедра "Аналитическая и физическая химия"
Объем дисциплины, ч. / з.е.	216 / 6
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен

Самара 2025

Б1.В.ДВ.01.02 «Машинное обучение и анализ данных»

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки (специальности) **04.03.01 Химия**, утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от № 671 от 17.07.2017 и соответствующего учебного плана.

Разработчик РПД:

Заведующий кафедрой, доктор химических наук, доцент	А.Ю Богомолов
(должность, степень, ученое звание)	(ФИО)

Заведующий кафедрой	А.Ю. Богомолов, доктор химических наук, доцент
	(ФИО, степень, ученое звание)

СОГЛАСОВАНО:

Председатель методического совета факультета / института (или учебно-методической комиссии)	О.В Лаврентьева, кандидат химических наук, доцент
	(ФИО, степень, ученое звание)
Руководитель образовательной программы	Ю.В. Рублинецкая, доктор химических наук, доцент
	(ФИО, степень, ученое звание)

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы 4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы 5
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся 7
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий 7
4.1 Содержание лекционных занятий 7
4.2 Содержание лабораторных занятий 10
4.3 Содержание практических занятий 12
4.4. Содержание самостоятельной работы 14
5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю) 16
6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения 16
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем 17
8. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю) 17
9. Методические материалы 18
10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) 19

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

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)
Профессиональные компетенции			
Не предусмотрено	ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.
			Знать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР
			Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.
		ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Владеть методами испытаний и техническими средствами
			Знать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР
			Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний
	ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.

			Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.
			Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.
	ПК-5 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания	ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных
			Знать необходимую информацию для поиска профессиональных данных
			Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках
Универсальные компетенции			
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи
			Знать информацию, требуемую для решения поставленных задач
			Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы: **часть, формируемая участниками образовательных отношений**

Код компетенции	Предшествующие дисциплины	Параллельно осваиваемые дисциплины	Последующие дисциплины
ПК-1	Инструментальные методы анализа и исследования; Основы хроматографии; Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа	Методы и средства экспресс-анализа; Практико-ориентированный проект; Современные методы химической экспертизы; Спектральные методы анализа и исследования; Хемометрика и информационные технологии в химии	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практикум: аналитический контроль; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы химической экспертизы
ПК-2	Инструментальные методы анализа и исследования; Метрология, стандартизация и сертификация; Основы хроматографии; Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа; Учебная практика: проектная практика	Методы и средства экспресс-анализа; Практико-ориентированный проект; Современные методы химической экспертизы; Спектральные методы анализа и исследования; Хемометрика и информационные технологии в химии	История и методология аналитической химии; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практикум: аналитический контроль; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы химической экспертизы
ПК-5	Инструментальные методы анализа и исследования; Метрология, стандартизация и сертификация; Основы хроматографии; Практико-ориентированный проект; Учебная практика: проектная практика	Практико-ориентированный проект; Современные методы химической экспертизы; Хемометрика и информационные технологии в химии	История и методология аналитической химии; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практикум: аналитический контроль; Современные методы химической экспертизы
УК-1	Введение в информационные технологии; Инструментальные методы анализа и исследования; Квантовая химия; Кристаллохимия; Математика; Метрология, стандартизация и сертификация; Неорганическая химия; Общая химия; Органическая химия; Основы аналитической химии; Основы хроматографии; Практико-ориентированный проект; Производственная практика: научно-исследовательская работа; Производственная практика: технологическая практика; Социология и право; Строение вещества; Теоретические основы инструментальных методов анализа; Учебная практика: ознакомительная практика; Учебная практика: проектная практика; Физика; Физическая химия; Философия	Высокомолекулярные соединения; Методы и средства экспресс-анализа; Практико-ориентированный проект; Современные методы химической экспертизы; Спектральные методы анализа и исследования; Хемометрика и информационные технологии в химии; Химические основы биологических процессов	История и методология аналитической химии; Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы; Практикум: аналитический контроль; Производственная практика: преддипломная практика; Современные методы химической экспертизы

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с

преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Вид учебной работы	Всего часов / часов в электронной форме	7 семестр часов / часов в электронной форме
Аудиторная контактная работа (всего), в том числе:	96	96
Лабораторные работы	32	32
Лекции	32	32
Практические занятия	32	32
Внеаудиторная контактная работа, КСР	6	6
Самостоятельная работа (всего), в том числе:	114	114
выполнение курсовых работ	28	28
подготовка к лабораторным работам	12	12
подготовка к практическим занятиям	42	42
подготовка к экзамену	16	16
подготовка мультимедийной презентации	16	16
Итого: час	216	216
Итого: з.е.	6	6

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

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы				
		ЛЗ	ЛР	ПЗ	СРС	Всего часов
1	Введение в анализ данных и машинное обучение	14	0	18	60	92
2	Обработка инструментальных данных	6	18	6	18	48
3	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	8	8	4	16	36
4	Химические ресурсы по химическому анализу	4	6	4	20	34
	КСР	0	0	0	0	6
	Итого	32	32	32	114	216

4.1 Содержание лекционных занятий

№ занятия	Наименование раздела	Тема лекции	Содержание лекции (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	Количество часов / часов в электронной форме
7 семестр				
1	Введение в анализ данных и машинное обучение	Основы анализа данных	Основные понятия: информация, данные и знания. Виды анализа данных: описательный, разведочный, индуктивный и т.д. Описательная статистика: основные показатели. Статистические исследования и статистические выводы. Прогностические и причинно-следственный анализ	2
2	Введение в анализ данных и машинное обучение	Информационная безопасность при работе с данными	Определение информационной безопасности. Виды информационной безопасности. Основные требования информационной безопасности при работе с данными Защита персональных и технологических данных. Обработка персональных и технологических данных. Последствия утечки персональных и технологических данных. Меры по защите персональных и технологических данных. Особенности защиты данных в профессиональной деятельности.	2
3	Введение в анализ данных и машинное обучение	Введение в машинное обучение	Основные понятия: искусственный интеллект, машинное обучение, большие данные, наука о данных. История развития. Принятие решений на основе анализа данных. Примеры применения методов машинного обучения при решении задач в химии и химической технологии. Обучение с учителем и без учителя, основные задачи и методы. Признаки, виды признаков в химии	2
4	Введение в анализ данных и машинное обучение	Основные этапы проекта машинного обучения	Контрольный перечень этапов проекта машинного обучения. Сбор, анализ и подготовка данных. Выделение признаков. Разведочный анализ: классификация признаков по типу, пропуски в данных, выбросы, распределения числовых признаков, зависимости и т.д. Подготовка признаков: нормализация числовых признаков, кодирование категориальных признаков. Особенности работы с многомерными данными, сжатие данных. Проблема недообучения и переобучения, ошибки в принятии решений, которые за этим следуют.	2
5	Введение в анализ данных и машинное обучение	Обучение без учителя. Задача кластеризации	Постановка задачи, примеры прикладных задач. Метрики. Оценка качества. «Жесткая» и «мягкая» кластеризация. Обзор и сравнительная характеристика алгоритмов. Основные алгоритмы: метод k-средних, DBSCAN	2

6	Введение в анализ данных и машинное обучение	Обучение с учителем. Задача классификации	Постановка задачи. Основные методы: k-ближайших соседей, деревья решений, метод опорных векторов, байесовский классификатор, логистическая регрессия, метод главных компонент. Оценка качества классификации. Метрики.	2
7	Введение в анализ данных и машинное обучение	Обучение с учителем. Задача регрессии	Постановка задачи. Линейная регрессия. Полиномиальная регрессия. Переобучение и недообучение. Гребневая регрессия. Лассо-регрессия. Метод градиентного спуска. Оценка качества. Подбор параметров.	2
8	Обработка инструментальных данных	Основные направления применения компьютеров в химии. Роль компьютерных технологий в развитии аналитической химии	Использование компьютеров для сбора, документирования и обработки химической информации. Общая характеристика программного обеспечения и баз данных для обработки и хранения информации в аналитической химии	2
9	Обработка инструментальных данных	Планирование эксперимента	Основы планирования эксперимента. Планирование оптимального эксперимента в аналитической химии. Виды экспериментального дизайна.	2
10	Обработка инструментальных данных	Первичная обработка и разведочный анализ данных	Инструментальные данные в аналитической химии: спектры, хроматограммы, сенсорные данные. Загрузка данных и их подготовка к анализу, алгоритмы предобработки данных. Цели и методы разведочного анализа данных.	2
11	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Введение в хемометрику	Статистический анализ данных. Что такое хемометрика, ее цели и задачи, роль в современной аналитической химии	2
12	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Градуировка	Цель построения градуировки на данных инструментальных измерений. Одномерная и многомерная градуировка. Алгоритмы градуировки в хемометрике	2
13	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Классификация	Виды классификационных моделей. Модели «с учителем» и самообучающиеся. Обучение классификационных моделей. Выбор классификационной (дискриминационной) модели для имеющейся аналитической задачи	2
14	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Проверка моделей	Зачем нужна проверка моделей? Методы проверки градуировочных моделей. Методы проверки классификационных моделей. Валидация проверочным набором и кросс-валидация. Пермутация	2

15	Химические ресурсы по химическому анализу	ПО и Интернет-ресурсы по химическому анализу: спектральные базы данных и методики анализа	Химические ресурсы Интернета. Универсальные поисковые средства: Браузеры, словари, энциклопедии, переводчики текстов. Специализированные поисковые интернет-платформы: Web of Science, Scopus. Основные научные издательства и химические общества Elsevier, Pergamon, Kluwer, Teylor & Francis, Thieme, Wiley, Springer. Список бесплатных полнотекстовых химических журналов – метасайт ABC Chemistry. Каталог журналов открытого доступа - Directory of Open Access Journals. Поиск статей, методик анализа, подготовка статьи к публикации	2
16	Химические ресурсы по химическому анализу	Электронные химические журналы. Патенты и патентные базы данных.	Патенты и патентные заявки. Тематический поиск патентной информации и поиск патента по его номеру. Спектральные базы данных. Поиск по спектральной базе данных AIST	2
			Итого за семестр:	**32**
			Итого:	**32**

4.2 Содержание лабораторных занятий

№ занятия	**Наименование раздела**	**Тема лабораторного занятия**	**Содержание лабораторного занятия** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов / часов в электронной форме**
7 семестр				
1	Обработка инструментальных данных	Работа с программным обеспечением ACD/Labs. ACD/ChemSketch, ACD/Spectrus	Изображение молекулярных структур в химическом редакторе ChemSketch. текстовые средства редактора: изображение графиков, создание таблиц, презентаций	2
2	Обработка инструментальных данных	Работа с программным обеспечением ACD/Labs. ACD/ChemSketch, ACD/Spectrus	Использование графических возможностей редактора ACD/ChemSketch для создания научного доклада и публикации	2
3	Обработка инструментальных данных	Работа с программным обеспечением ACD/Labs. ACD/ChemSketch, ACD/Spectrus	Графическое представление спектров. Преобразование спектров между единицами пропускание - поглощение, длины волн – волновые числа	2

4	Обработка инструментальных данных	Планирование эксперимента. Работа с Excel.	Построить таблицы экспериментальных дизайнов для: полнофакторного, центрально-факторного, случайного и диагонального дизайна для двух и трех компонентов. Посчитать попарные корреляции компонентов	2
5	Обработка инструментальных данных	Планирование эксперимента. Работа с doe4reg	Построение различных диагональных дизайнов	2
6	Обработка инструментальных данных	Планирование эксперимента. Работа с doe4reg.	Оценка качества схем экспериментального планирования: расчет корреляции, полноты и равномерности заполнения	2
7	Обработка инструментальных данных	Первичная обработка и разведочный анализ данных. Работа с ACD/Spectrus.	Загрузка ИК-, БИК- и УФ/Вид-спектров в ACD/Spectrus. Нахождение пиков, таблица пиков. Использование встроенной идентификации пиков по фрагментам прикрепленной химической структуры.	2
8	Обработка инструментальных данных	Первичная обработка и разведочный анализ данных. Работа с ACD/Spectrus	Предобработка спектральных данных. Сглаживание, взятие производной. Вычитание спектров.	2
9	Обработка инструментальных данных	Первичная обработка и разведочный анализ данных. Работа с ACD/Spectrus.	Поиск спектра во встроенной спектральной базе данных.	2
10	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Введение в хемометрику. Работа с The Unscrambler.	Освоение основные возможности программы TheUnscrambler для анализа многомерных (спектральных) данных.	2
11	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Введение в хемометрику. Работа с mdatools.	Освоение основных возможностей пакета mdatools. Методы разведочного анализа. Метод главных компонент	2
12	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Введение в хемометрику Работа с TPT-cloud	Освоение основных возможностей пакета TPT-cloud. Методы разведочного анализа. Метод главных компонент	2
13	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Градуировка. Работа с TheUnscrambler	Построение градуировочной модели на спектральных данных. Методы регрессии: МЛР, ПЛС, РГК. Типы полей	2

14	Химические ресурсы по химическому анализу	Поиск научных статей в Интернете	Поиск статьи по ключевым словам в Интернете: в ScienceDirect, GoogleScholar. Свободный поиск.	2
15	Химические ресурсы по химическому анализу	Поиск патентной информации в Интернете	Поиск патентной информации в американской, европейской, российской системах защиты авторских прав.	2
16	Химические ресурсы по химическому анализу	Поиск спектральной информации в Интернете.	Поиск ИК, БИК, масс- спектров в спектральной базе данных AIST. Скачивание данных на локальный компьютер.	2
			Итого за семестр:	**32**
			Итого:	**32**

4.3 Содержание практических занятий

№ занятия	**Наименование раздела**	**Тема практического занятия**	**Содержание практического занятия** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов / часов в электронной форме**
7 семестр				
1	Введение в анализ данных и машинное обучение	Основные понятия и принципы анализа данных в химии	Цели и задачи химического анализа. - Понятие погрешности измерения: систематическая ошибка, случайная ошибка. - Способы выражения ошибок измерений: абсолютная и относительная погрешность. - Закон распространения ошибок при косвенных измерениях	2
2	Введение в анализ данных и машинное обучение	Методы первичной обработки данных	Среднее арифметическое значение и дисперсия выборки. - Нормальное распределение и закон больших чисел. - Критерии проверки гипотез (например, критерий Стъюдента). - Проверка значимости различий средних значений.	2
3	Введение в анализ данных и машинное обучение	Методика построения калибровочных кривых	Линейная регрессия и построение калибровочной прямой. - Коэффициент корреляции и его использование. - Расчет доверительных интервалов для результата анализа	2
4	Введение в анализ данных и машинное обучение	Основные понятия: искусственный интеллект, машинное обучение, большие данные, наука о данных.	Искусственный интеллект и машинное обучение: понятие, связь друг с другом. - Большие данные и наука о данных: отличие от традиционных подходов. - Исторический экскурс: от ранних этапов зарождения машинного обучения до современного состояния.	2
5	Введение в анализ данных и машинное обучение	Основные понятия: искусственный интеллект, машинное обучение, большие данные, наука о данных.	Постановка проблемы принятия решений в условиях неопределенности. - Роль анализа данных в принятии оптимальных решений. - Специфичные особенности химического производства и необходимость применения технологий анализа данных.	2

6	Введение в анализ данных и машинное обучение	Примеры применения методов машинного обучения в химии	- Классификация веществ и материалов на основе структурных характеристик. - Оптимизация технологических процессов синтеза соединений. - Прогнозирование свойств новых материалов и катализаторов.	2
7	Введение в анализ данных и машинное обучение	Особенности классификации и видов признаков в химии	Качественные признаки и их роль в описании химических объектов. - Количественные признаки: характеристики состава, структуры, физико-химических свойств. - Преобразование признаков для улучшения качества модели.	2
8	Введение в анализ данных и машинное обучение	Алгоритмы обучения с учителем и без учителя	Классические алгоритмы обучения с учителем: линейная регрессия, логистическая регрессия, метод ближайших соседей. - Алгоритмы кластеризации и их применение в химии: k-means, иерархическая кластеризация. - Примеры задач химической индустрии, решаемых с помощью указанных методов	2
9	Введение в анализ данных и машинное обучение	Искусственный интеллект и машинное обучение	Решение конкретных задач в сфере химии и химической технологии. Пример 1.Задача предсказания токсичности нового соединения на основе известных химических показателей. Пример 2. Использование метода главных компонент для выявления скрытых зависимостей в характеристиках материала.	2
10	Обработка инструментальных данных	Методы машинного обучения, как основа хемометрики и хемоинформатики	Обзор задач для машинного обучения в химии и химической технологии. Хемометрика и хемоинформатика – задачи и объекты исследования. Преимущества применения методов машинного обучения в информационно-аналитической, научно-исследовательской, производственно-технологической деятельности, в системах управления и принятия решений. Проблемы машинного обучения в управлении профессиональной деятельностью	2
11	Обработка инструментальных данных	Особенности сбора и обработки химических данных. Базы данных по химии.	Разнообразие химических данных, подходы к сбору, анализу и предварительной подготовке данных. Структурные базы данных. Молекулярные дескрипторы.	2
12	Обработка инструментальных данных	Особенности сбора и обработки химических данных. Базы данных по химии	Что такое химическая база данных 2. Какие типы химических данных существуют 3. Как классифицируются химические базы данных 4. Основные принципы организации химического поиска в базах данных. 5. Примеры популярных отечественных и зарубежных баз данных по химии	2
13	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Классификация и прогнозирование с помощью нейронных сетей	Нейронные сети: основные понятия, классификация и прогнозирование с помощью нейронных сетей. Построение и обучение нейронной сети.	2

14	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Методы машинного обучения в решении задач аналитической химии	Хемометрика. Методы классификации и регрессии в решении задач аналитической химии. Валидация хемометрических моделей	2
15	Химические ресурсы по химическому анализу	Многомерные модели в решении задач QSAR, в фармацевтической химии и экологии.	Решение задач о взаимосвязи структура-свойства (QSAR) и возможности методов машинного обучения. Решение задач классификации (бинарной и многоклассовой) и прогнозирования в фармацевтической химии и экологии.	2
16	Химические ресурсы по химическому анализу	Методы машинного обучения в решении химико-технологических задач	Методы машинного обучения в решении задач системного анализа химико-технологических процессов, оптимизация параметров химических процессов и систем на их основе	2
			Итого за семестр:	**32**
			Итого:	**32**

4.4. Содержание самостоятельной работы

Наименование раздела	**Вид самостоятельной работы**	**Содержание самостоятельной работы** (перечень дидактических единиц: рассматриваемых подтем, вопросов)	**Количество часов**
7 семестр			
Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка к практическому занятию	Основные понятия и принципы анализа данных в химии. Методы первичной обработки данных	6
Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка к практическому занятию	Методика построения калибровочных кривых. Линейная регрессия и построение калибровочной прямой.	6
Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка презентации по выбранной теме	Основные понятия: искусственный интеллект, машинное обучение, большие данные, наука о данных.	6
Введение в анализ данных и машинное обучение	Выполнение курсовых работ	Примеры применения методов машинного обучения в химии	12
Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка к практическому занятию.	Классические алгоритмы обучения с учителем: линейная регрессия, логистическая регрессия, метод ближайших соседей.	10

Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка к практическому занятию.	Характеристика основных видов анализа данных: - Описательный (дескриптивный) + Представление общих характеристик набора данных - Разведочный (exploratory data analysis) + Поиск скрытых закономерностей и взаимосвязей - Индуктивный (inductive) + Обобщение частных наблюдений в общие правила - Дедуктивный (deductive) + Проверка гипотез путем сопоставления теории и эмпирики - Предсказательный (predictive) + Моделирование будущих значений на основе текущих данных - Причинно-следственный (causal) + Выявление причинно-следственных связей между переменными	10
Введение в анализ данных и машинное обучение	Подготовка к экзамену	Контрольный перечень этапов проекта машинного обучения. Сбор, анализ и подготовка данных. Выделение признаков. Разведочный анализ: классификация признаков по типу, пропуски в данных, выбросы, распределения числовых признаков, зависимости и т.д. Подготовка признаков: нормализация числовых признаков, кодирование категориальных признаков. Особенности работы с многомерными данными, сжатие данных.	10
Обработка инструментальных данных	Подготовка к лабораторным работам	Построение экспериментальных дизайнов различных типов с использованием Excel и другого ПО.	6
Обработка инструментальных данных	Подготовка к экзамену	Построение экспериментальных дизайнов различных типов с использованием Excel и другого ПО	6
Обработка инструментальных данных	Подготовка презентации по выбранной теме	Поиск спектров в базе AIST. Подготовка презентации по теме: планирование эксперимента	6
Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Подготовка к лабораторным работам	Выполнение домашнего задания по построению многомерной градуировочной модели методом ПЛС	4
Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Выполнение курсовых работ	Выполнение домашнего задания по построению многомерной градуировочной модели методом ПЛС.	6
Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	Подготовка к экзамену	Выполнение домашнего задания по построению многомерной градуировочной модели методом ПЛС	6

Химические ресурсы по химическому анализу	Подготовка к лабораторным работам	Поиск ИК, БИК, масс- спектров в спектральной базе данных AIST. Скачивание данных на локальный компьютер.	2
Химические ресурсы по химическому анализу	Подготовка к экзамену	Поиск ИК, БИК, масс- спектров в спектральной базе данных AIST. Скачивание данных на локальный компьютер.	4
Химические ресурсы по химическому анализу	Подготовка презентации по выбранной теме	Поиск спектров в базе AIST. Подготовка презентации выбранной теме	4
Химические ресурсы по химическому анализу	Выполнение курсовых работ	Поиск спектров в базе AIST.	10
		Итого за семестр:	**114**
		Итого:	**114**

5. Перечень учебной литературы и учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

№ п/п	**Библиографическое описание**	**Ресурс НТБ СамГТУ** (ЭБС СамГТУ, IPRbooks и т.д.)
Основная литература		
1	Федотова , Е.Л. Информационные технологии и системы : учеб.пособие / Е. Л. Федотова.- М., ФОРУМ, 2009М., Инфра-М.- 351 с.	Книжный фонд
2	Федотова , Е.Л. Информационные технологии и системы : учеб.пособие / Е. Л. Федотова.- М., ФОРУМ, 2009М., Инфра-М.- 351 с.	Книжный фонд
3	Шараф, М.А. Хемометрика : пер.с англ. / М. А. Шараф, Д. Л. Иллмэн, Б. Р. Ковальски ; под ред.: И. А. Ибрагимова, А. К. Чарыкова.- Л., Химия, 1989.- 269 с.	Книжный фонд
4	Шараф, М.А. Хемометрика : пер.с англ. / М. А. Шараф, Д. Л. Иллмэн, Б. Р. Ковальски ; под ред.: И. А. Ибрагимова, А. К. Чарыкова.- Л., Химия, 1989.- 269 с.	Книжный фонд

Доступ обучающихся к ЭР НТБ СамГТУ (elib.samgtu.ru) осуществляется посредством электронной информационной образовательной среды университета и сайта НТБ СамГТУ по логину и паролю.

6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения

При проведении лекционных занятий используется мультимедийное оборудование.

Организовано взаимодействие обучающегося и преподавателя с использованием электронной ин-формационной образовательной среды университета.

№ п/п	**Наименование**	**Производитель**	**Способ распространения**

1	ACD/ Spectrus	Advanced Chemistry Development (Зарубежный)	Лицензионное
2	ChemSketch	Advanced Chemistry Development (Зарубежный)	Свободно распространяемое
3	TheUnscrambler	CAMO (Зарубежный)	Лицензионное
4	TPT-cloud	Mestrelab (Зарубежный)	Свободно распространяемое
5	Операционная система Windows XP	Microsoft (Зарубежный)	Лицензионное

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», профессиональных баз данных, информационно-справочных систем

№ п/п	Наименование	Краткое описание	Режим доступа
1	American Chemical Society (ACS)	www.pubs.acs.org	Ресурсы открытого доступа
2	портал химического образования России	http://www.chem.msu.su	Ресурсы открытого доступа
3	ScienceDirect - 4 коллекции: Chemistry, Engineering, Materials Science, Physics and Astronomy	http://www.sciencedirect.com/	Зарубежные базы данных ограниченного доступа
4	РОСПАТЕНТ	http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru	Ресурсы открытого доступа
5	Сайт библиотеки Химического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова	http://www.chem.msu.su/rus/library/welcome.html	Ресурсы открытого доступа
6	Scopus - база данных рефератов и цитирования	http://www.scopus.com/	Зарубежные базы данных ограниченного доступа
7	eLIBRARY.ru	http://www.eLIBRARY.ru/	Российские базы данных ограниченного доступа

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

Лекционные занятия

Аудитории для лекционных занятий укомплектованы мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории (наборы

демонстрационного оборудования (проектор, экран, компьютер/ноутбук), учебно-наглядные пособия, тематические иллюстрации).

Практические занятия

-Для практических занятий используются аудитория №34/35 (корпус №2), оснащенная компьютерами с доступом в Интернет и предназначенные для работы в электронной образовательной среде.

Лабораторные занятия

Помещения оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и доступом к электронной информационно-образовательной среде СамГТУ:

- компьютерные классы (ауд. 208, 210 корпус № 8, ауд. 34 корпус № 2)

Самостоятельная работа

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и доступом к электронной информационно-образовательной среде СамГТУ:

- читальный зал НТБ СамГТУ (ауд. 200 корпус № 8; ауд. 125 корпус № 1; ауд. 41, 31, 34, 35 Главный корпус библиотеки, ауд. 83а, 414, 416, 0209 АСА СамГТУ; ауд. 401 корпус №10);
- компьютерные классы (ауд. 208, 210 корпус № 8).

9. Методические материалы

Методические рекомендации при работе на лекции

До лекции студент должен просмотреть учебно-методическую и научную литературу по теме лекции с тем, чтобы иметь представление о проблемах, которые будут разбираться в лекции.

Перед началом лекции обучающимся сообщается тема лекции, план, вопросы, подлежащие рассмотрению, доводятся основные литературные источники. Весь учебный материал, сообщаемый преподавателем, должен не просто прослушиваться. Он должен быть активно воспринят, т.е. услышан, осмыслен, понят, зафиксирован на бумаге и закреплен в памяти. Приступая к слушанию нового учебного материала, полезно мысленно установить его связь с ранее изученным. Следя за техникой чтения лекции (акцент на существенном, повышение тона, изменение ритма, пауза и т.п.), необходимо вслед за преподавателем уметь выделять основные категории, законы и определять их содержание, проблемы, предполагать их возможные решения, доказательства и выводы. Осуществляя такую работу, можно значительно облегчить себе понимание учебного материала, его конспектирование и дальнейшее изучение.

Конспектирование лекции позволяет обработать, систематизировать и лучше сохранить полученную информацию с тем, чтобы в будущем можно было восстановить в памяти основные, содержательные моменты. Типичная ошибка, совершаемая обучающимся, дословное конспектирование речи преподавателя. Как правило, при записи «слово в слово» не остается времени на обдумывание, анализ и синтез информации. Отбирая нужную информацию, главные мысли, проблемы, решения и

выводы, необходимо сокращать текст, строить его таким образом, чтобы потом можно было легко в нем разобраться. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых можно будет делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. С окончанием лекции работа над конспектом не может считаться завершенной. Нужно еще восстановить отдельные места, проверить, все ли понятно, уточнить что-то на консультации и т.п. с тем, чтобы конспект мог быть использован в процессе подготовки к практическим занятиям, зачету, экзамену. Конспект лекции – незаменимый учебный документ, необходимый для самостоятельной работы.

Методические рекомендации при работе на лабораторном занятии

Проведение лабораторной работы делится на две условные части: теоретическую и практическую.

Необходимыми структурными элементами занятия являются проведение лабораторной работы, проверка усвоенного материала, включающая обсуждение теоретических основ выполняемой работы.

Перед лабораторной работой, как правило, проводится технико-теоретический инструктаж по использованию необходимого оборудования. Преподаватель корректирует деятельность обучающегося в процессе выполнения работы (при необходимости). После завершения лабораторной работы подводятся итоги, обсуждаются результаты деятельности.

Возможны следующие формы организации лабораторных работ: фронтальная, групповая и индивидуальная. При фронтальной форме выполняется одна и та же работа (при этом возможны различные варианты заданий). При групповой форме работа выполняется группой (командой). При индивидуальной форме обучающимися выполняются индивидуальные работы.

По каждой лабораторной работе имеются методические указания по их выполнению, включающие необходимый теоретический и практический материал, содержащие элементы и последовательную инструкцию по проведению выбранной работы, индивидуальные варианты заданий, требования и форму отчётности по данной работе.

Методические рекомендации по выполнению самостоятельной работы

Организация самостоятельной работы обучающихся ориентируется на активные методы овладения знаниями, развитие творческих способностей, переход от поточного к индивидуализированному обучению с учетом потребностей и возможностей обучающегося.

Самостоятельная работа с учебниками, учебными пособиями, научной, справочной литературой, материалами периодических изданий и Интернета является наиболее эффективным методом получения дополнительных знаний, позволяет значительно активизировать процесс овладения информацией, способствует более глубокому усвоению изучаемого материала. Все новые понятия по изучаемой теме необходимо выучить наизусть и внести в глоссарий, который целесообразно вести с самого начала изучения курса.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий;
- на лекциях, практических занятиях;
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания;
- на консультациях по учебным вопросам, в ходе творческих контактов, при ликвидации задолженностей, при выполнении индивидуальных заданий и т.д.;
- в библиотеке, дома, на кафедре при выполнении обучающимся учебных и практических задач.

Эффективным средством осуществления обучающимся самостоятельной работы является электронная информационно-образовательная среда университета, которая обеспечивает доступ к учебным планам, рабочим программам дисциплин (модулей), практик, к изданиям электронных библиотечных систем.

10. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств представлен в приложении № 1.

Приложение 1 к рабочей программе дисциплины
Б1.В.ДВ.01.02 «Машинное обучение и анализ данных»

Фонд оценочных средств
по дисциплине
Б1.В.ДВ.01.02 «Машинное обучение и анализ данных»

Код и направление подготовки (специальность)	04.03.01 Химия
Направленность (профиль)	Аналитическая химия
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	Очная
Год начала подготовки	2025
Институт / факультет	Химико-технологический факультет
Выпускающая кафедра	кафедра "Аналитическая и физическая химия"
Кафедра-разработчик	кафедра "Аналитическая и физическая химия"
Объем дисциплины, ч. / з.е.	216 / 6
Форма контроля (промежуточная аттестация)	Экзамен

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть, соотнесенные с индикаторами достижения компетенции)
Профессиональные компетенции			
Не предусмотрено	ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.
			Знать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР
			Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.
		ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Владеть методами испытаний и техническими средствами
			Знать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР
			Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний
	ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.

			Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.
			Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.
	ПК-5 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания	ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных
			Знать необходимую информацию для поиска профессиональных данных
			Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках
Универсальные компетенции			
Системное и критическое мышление	УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи
			Знать информацию, требуемую для решения поставленных задач
			Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению

Матрица соответствия оценочных средств запланированным результатам обучения

Код индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Оценочные средства	Текущий контроль успеваемости	Промежуточная аттестация

Введение в анализ данных и машинное обучение				
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Знать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Выполнение курсовой работы	Да	Да
		Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	**Знать** технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Экзамен	Да	Да
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет

ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	**Знать** необходимую информацию для поиска профессиональных данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Экзамен	Да	Да
УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Владеть** определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Экзамен	Да	Да
	Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать информацию, требуемую для решения поставленных задач	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
Обработка инструментальных данных				
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	**Знать** отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	**Владеть** методами испытаний и техническими средствами	Экзамен	Да	Да

	Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	**Владеть** навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Экзамен	Да	Да
	Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Знать необходимую информацию для поиска профессиональных данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Владеть** определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да

	Знать информацию, требуемую для решения поставленных задач	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Экзамен	Да	Да
Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели				
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	**Знать** технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Экзамен	Да	Да
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет

	Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	**Знать** необходимую информацию для поиска профессиональных данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Экзамен	Да	Да
УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Владеть** определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Экзамен	Да	Да
	Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать информацию, требуемую для решения поставленных задач	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
Химические ресурсы по химическому анализу				
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	**Знать** отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет

	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
ПК-1.3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	**Владеть** методами испытаний и техническими средствами	Экзамен	Да	Да
	Уметь Выбирать технические средства и методы испытаний	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть методами испытаний и техническими средствами	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
ПК-2.2 Использует специализированное программное обеспечение и базы данных для получения и первичной обработки экспериментальных данных	**Владеть** навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Знать основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при проведении теоретических расчетов и обработке экспериментальных данных.	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Уметь использовать специализированное программное обеспечение при представлении результатов работы профессиональному сообществу.	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть навыками представления результатов работы в виде печатных материалов и устных сообщений.	Экзамен	Да	Да
ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч. патентных)	**Владеть** навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Экзамен	Да	Да
	Уметь искать необходимую информацию в профессиональных источниках	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Знать необходимую информацию для поиска профессиональных данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет

	Владеть навыками поиска необходимой информации в профессиональных базах данных	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
УК-1.3 Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов	**Знать** информацию, требуемую для решения поставленных задач	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Доклад с презентацией по выбранной теме	Да	Нет
		Выполнение курсовой работы	Да	Да
	Уметь определять пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектировать процессы по их устранению	отчёт по практическим работам	Да	Нет
	Владеть определением, интерпретацией информации , требуемой для решения поставленной задачи	Экзамен	Да	Да

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие процесс формирования компетенций в ходе освоения образовательной программы.

Формы текущего контроля успеваемости

Примерные вопросы к отчётам по

лабораторным работам:

1. Какие виды экспериментальных дизайнов (планов) вы знаете?
2. Какое программное обеспечение необходимо для предварительной обработки данных и их подготовки к анализу?
3. Какие виды инструментальных данных в аналитической химии вы знаете?
4. Что такое машинное обучение?
5. Какие методы градуировки для определения концентрации из инструментальных данных вы знаете?
6. Что такое счета и нагрузки в ПЛС- или МГК-модели и как ими пользоваться?
7. Какие методы проверки моделей в машинном обучении Вы знаете?
8. Как найти нужный спектр в базе данных AIST?
9. Что такое импакт-фактор журнала?

Доклад с презентацией по выбранной теме. Перечень тем

1) Планирование многокомпонентного градуировочного эксперимента

2) Методы разведочного анализа данных

3) Методы сглаживания и взятия производной

4) Методы нормировки спектров

5) Вычитание спектров для решения задач химического анализа

6) Простая и многомерная градуировка, сравнение методов и алгоритмов

7) Интерпретация счетов и нагрузок ПЛС и МГК-модели, построенной на спектральных данных

8) Методы валидации и сравнения градуировочных моделей в машинном обучении

9) Методы валидации и сравнения классификационных моделей

Формы промежуточной аттестации.
Перечень вопросов для подготовки к экзамену

1. Использование компьютеров для сбора, документирования и обработки химической информации. Общая характеристика программного обеспечения и баз данных для обработки и хранения информации в аналитической химии.

2. Основы планирования эксперимента. Планирование оптимального эксперимента в аналитической химии. Виды экспериментального дизайна. Планирование градуировочного эксперимента в спектральном анализе

3. Инструментальные данные в аналитической химии: спектры, хроматограммы, сенсорные данные. Загрузка данных и их подготовка к анализу, алгоритмы предобработки данных. Цели и методы разведочного анализа данных.

4. Статистический анализ данных. Что такое хемометрика, ее цели и задачи, роль в современной аналитической химии. Примеры одномерного и многомерного подхода в химическом анализе. Методы «машинного обучения».

5. Цель построения градуировки на данных инструментальных измерений. Одномерная и многомерная градуировка. Алгоритмы градуировки в хемометрике.

6. Виды классификационных моделей. Модели «с учителем» и самообучающиеся. Обучение классификационных моделей. Выбор классификационной (дискриминационной) модели для имеющейся аналитической задачи.

7. Зачем нужна проверка моделей? Методы проверки градуировочных моделей. Методы проверки классификационных моделей. Валидация проверочным набором и кросс-валидация. Пермутация

8. Химические ресурсы Интернета. Универсальные поисковые средства: Браузеры, словари, энциклопедии, переводчики текстов. Специализированные поисковые интернет-платформы: Web of Science, Scopus. Основные научные издательства и химические общества Elsevier, Pergamon, Kluwer, Teylor & Francis, Thieme, Wiley, Springer. Список бесплатных полнотекстовых химических журналов – метасайт ABC Chemistry. Каталог журналов открытого доступа - Directory of Open Access Journals. Поиск статей, методик анализа, подготовка статьи к публикации. Патенты и патентные заявки. Тематический поиск патентной информации и поиск патента по его номеру. Спектральные базы данных. Поиск по спектральной базе данных AIST.

Примерный перечень тем курсовых работ

1. Метод модуляции и спектральных помех (химические, физические, ионизационные и спектральные помехи)
2. Метод калибровки, калибровочные модели.
3. Методика проведения анализа метод ИК-спектрометрии. Физика-химический контроль качества лекарственного препарата салициловая кислота (субстанция)
4. Методика определения спектро-фотометрией лекарственного препарата резоцина
5. Люминесценция спектроскопия органических соединений: принципы и приложения

6. Применение планирования эксперимента в аналитической химии.

7. Современные подходы к дизайну химического эксперимента: от однофакторного анализа до компьютерного моделирования.

8. Контроль качества фармацевтических продуктов с помощью оптических мультисенсорных систем

9. Принцип работы оптических мультисенсорных систем.

10. Оптическое мультисенсорное устройство для анализа

Тестовые задания с ключами ответов
Типовые задания для промежуточной аттестации по дисциплине
Б1.В.ДВ.01.02 Машинное обучение и анализ данных
(шифр и наименование дисциплины)

для направления 04.03.01 Аналитическая химия
(шифр и наименование направления подготовки, специальности)

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации				
1.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Какого вида признаков при описании объекта для машинного обучения не существует? А. Линейного Б. Номинального В. Количественного Г. Бинарного	А	Введение в машинное обучение	7
2.	**Прочитайте текст вопроса и выберите два правильных ответа:** Укажите, какие из перечисленных мер защиты данных являются наиболее эффективными для предотвращения несанкционированного доступа к конфиденциальной информации? А.Регулярное резервное копирование информации Б.Использование многофакторной аутентификации при доступе к данным В.Размещение предупреждающих баннеров о конфиденциальности Г.Применение криптографических алгоритмов для шифрования данных Д.Проведение ежегодных инструктажей по безопасности	Б, Г	Информационная безопасность при работе с данными	7
3.	**Прочитайте текст и запишите развернутый ответ:** Основные типы задач машинного обучения - это _____.	Классификация — определение категории объекта на основе его признаков. Регрессия — предсказание числовых значений. Кластеризация — группировка объектов по схожести.	Введение в машинное обучение	7
4.	**Соотнесите этапы проекта машинного обучения с их основными задачами:** Этапы проекта: А. Понимание бизнес-проблемы Б. Сбор и подготовка данных В. Конструирование модели Г. Внедрение модели	А–4 Б–1 В–3 Г–2	Основные этапы проекта машинного обучения	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	Д. Поддержка модели Задачи этапов: 1. Предобработка и очистка данных 2. Интеграция модели в информационную си стему 3. Генерация и отбор признаков 4. Определение целей проекта, формулиров ка задачи			
5.	**Выберите ключевой аспект:** Для качественного набора данных в анализе? А. Актуальность данных Б. Достоверность данных В. Объем данных Г. Разнообразие данных	Б	Основы анализа данных	7
6.	**Прочитайте текст и установите последовательность:** Укажите последовательность этапов работы с данными в машинном обучении , запишите соответствующую последовательность цифр слева направо А. Сбор и подготовка данных Б. Построение и обучение модели В. Постановка бизнес-задачи Г. Проверка модели Д. Внедрение модели	В → А → Б → Г → Д	Основные этапы проекта машинного обучения	7
7.	**Прочитайте текст вопроса и дополните форазу:** При передаче данных по открытым каналам связи для обеспечения конфиденциальности используется _____.	Шифрование данных	Информационн ая безопасность при работе с данными	7
8.	**Прочитайте текст вопроса и выберите два правильных ответа:** Выберете критически важные этапы проекта машинного обучения для обеспе чения качества итоговой модели А.Предобработка данных и очистка от выбросов Б. Выбор метода проверки итоговой модели В. Визуализация результатов Г. Практическое внедрение модели Д. Сбор и подготовка данных	А, Д	Основные этапы проекта машинного обучения	7
9.	**Прочитайте текст и напишите определение:** Признак в анализе данных представляет собой _____.	Измеримую и ли описываем ую характерис тику объекта.	Основы анализа данных	7
10.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите ключевое различие между методами «жесткой» и «мягкой» кластеризации А. В «жесткой» кластеризации объект может	В	Обучение без учителя. Задача кластеризации	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	принадлежать нескольким кластерам Б. В «мягкой» кластеризации каждый объект принадлежит только одному кластеру В. В «жесткой» кластеризации каждый объект относится только к одному кластеру Г. В «мягкой» кластеризации используется только один признак			
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работ				
11.	**Прочитайте текст вопроса и установите соответствие:** Сопоставьте алгоритмы кластеризации с их характеристиками: Алгоритмы: А. K-means Б. DBSCAN В. Иерархическая кластеризация Г. Mean Shift Характеристики: 1. Группирует объекты на основе плотности, автоматически определяет количество кластеров 2. Требует предварительного указания количества кластеров 3. Создает древовидную структуру кластеров, не требует указания их числа 4. Находит кластеры путем сдвига точек к локальным максимумам плотности	А–2 Б–1 В–3 Г–4	Основы анализа данных	7
12.	**Прочитайте текст и напишите определение:** В контексте анализа данных и машинного обучения регрессия - это _____.	метод машинного обучения, направленный на предсказание количественных значений на основе входных данных	Основы анализа данных	7
13.	**Прочитайте текст и напишите определение:** В контексте анализа данных и машинного обучения компьютерная химия — это _____.	область, в которой методы анализа данных и математические модели применяются для решения задач химии, включая количественный и качественный анализ, моделирование веществ и процессов	Основы анализа данных	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
14.	**Прочитайте текст вопроса и выберите два правильных ответов:** Какие из следующих утверждений правильно описывают сущность кластеризации как задачи машинного обучения? А. Разделение объектов на группы по сходству Б. Требует наличия заранее размеченных данных В. Поиск скрытой структуры в данных Г. Требует задания числа кластеров Д. Классификация объектов по заранее заданным классам	А, В	Основы анализа данных	7
15.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите определение роли компьютерных технологий в современной аналитической химии А. Используются для визуализации результатов Б. Обеспечивают интеграцию приборов и управление экспериментами В. Используются для хранения данных Г. Применяются для статистической обработки результатов	Б	Основы анализа данных	7
16.	**Прочитайте текст и выберите верный ответ: Обоснуйте его.** Какая из следующих метрик используется для оценки качества регрессионной модели? А. Точность Б. Полнота В. Среднеквадратичная ошибка Г. F-мера	В Среднеквадратичная ошибка — это метрика, измеряющая среднее квадратичное отклонение предсказанных значений от истинных.	Проверка моделей	7
17.	**Прочитайте текст вопроса и установите соответствие:** Установите правильную последовательность этапов построения регрессионной модели, запишите соответствующую последовательность цифр слева направо. А. Выбор и настройка алгоритма Б. Сбор и подготовка данных В. Оценка качества модели Г. Анализ результатов Д. Предварительная обработка данных	Б → Д → А → В → Г	Проверка моделей	7
18.	**Прочитайте текст и установите правильную последовательность:** Укажите последовательность этапов внедрения компьютерных технологий в аналитическую химию, запишите соответствующую последовательность цифр	3 → 4 → 1 → 2	Основные направления применения компьютеров в химии. Роль компьютерных технологий в развитии аналитической	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	слева направо: 1. Интеграция аналитических приборов в единые системы управления 2. Переход к “однокнопочным” приборам с автоматизированными процедурами 3. Автоматизация сбора и обработки экспериментальных данных 4. Появление методов диагностики, невозможных без компьютеров (например, томография)		химии	
19.	**Прочитайте текст вопроса и установите соответствие:** Сопоставьте направления применения компьютерных технологий в аналитической химии с их описанием Направления: А. Автоматизация сбора данных Б. Обработка экспериментальных результатов В. Управление лабораторными системами Г. Хранение и поиск информации Описания: 1. Использование лабораторных информационных систем (LIMS) для управления оборудованием и контроля процессов 2. Применение методов математической статистики и машинного обучения для анализа данных 3. Создание и ведение баз данных химических соединений и их свойств 4. Внедрение автоматических регистраторов данных и систем быстрого преобразования информации	А–4 Б–2 В–1 Г–3	Основные направления применения компьютеров в химии. Роль компьютерных технологий в развитии аналитической химии	7
20.	**Прочитайте текст и выберите верный ответ:** Укажите, какая цель соответствует проверке модели в задачах машинного обучения (хемометрики)? А. Определение структуры данных Б. Настройка параметров алгоритма В. Оценка качества модели на независимых данных Г. Сбор исходных данных	В	Введение в хемометрику	7
ПК-5 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-конструкторские работы и технологические испытания				
21.	**Прочитайте текст вопроса и установите соответствие:** Сопоставьте типы моделей анализа данных с их характеристиками. Типы моделей:	А–3 Б–4 В–1 Г–2	Основы анализа данных	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	А. Градуировочные модели Б. Классификационные модели В. Модели прогнозирования Г. Модели кластеризации Характеристики: 1. Прогнозирование будущих значений на основе данных 2. Группировка объектов по сходству без заданных классов 3. Установление количественной зависимости между параметрами 4. Разделение объектов на заранее заданные классы			
22.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите, что является основной целью планирования эксперимента в аналитической химии? А. Увеличение числа экспериментов Б. Получение максимального количества данных В. Оптимизация условий эксперимента и получение достоверных результатов Г. Исключение обработки данных	В	Планирование эксперимента	7
23.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите, какой тип данных наиболее характерен для инструментального анализа в аналитической химии? А. Текстовые данные Б. Спектры и хроматограммы В. Графические схемы Г. Табличные отчеты	Б	Планирование эксперимента	7
24.	**Прочитайте текст и выберите верный ответ. Обоснуйте его:** Укажите, что относится к источникам научной информации в области химии? А. Социальные сети Б. Научные журналы и базы данных В. Личные заметки исследователя Г. Популярные блоги	Б	Электронные химические журналы. Патенты и патентные базы данных	7
25.	**Прочитайте текст и выберите 2 верных ответа**: Укажите, что является объектом патентного поиска в химии? А. Учебные пособия Б. Научные статьи В. Патенты и патентные заявки	В	Электронные химические журналы. Патенты и патентные базы данных	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	Г. Лабораторные журналы			
26.	**Прочитайте текст и выберите верный ответ.** Укажите, какой вид анализа данных направлен на выявление скрытых закономерностей без предварительных гипотез? А. Описательный анализ Б. Разведочный анализ В. Индуктивный анализ Г. Причинно-следственный анализ	Б	Первичная обработка и разведочный анализ данных	7
27.	**Прочитайте текст и выберите три верных ответа**: Укажите меры обеспечения информационной безопасности при работе с данными? А. Увеличение объема данных Б. Использование паролей и разграничение доступа В. Упрощение структуры данных Г. Резервное копирование данных Д. Шифрование данных	Б, Г, Д	Информационная безопасность при работе с данными персональных и технологических данных. Меры по защите персональных и технологических данных. Особенности защиты данных в профессиональной деятельности	7
28.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите, что относится к методам кластеризации данных? А. Линейная регрессия Б. Метод k-средних В. Логистическая регрессия Г. Метод наименьших квадратов	Б	Обучение без учителя. Задача кластеризации	7
29.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ:** Укажите, что является признаком переобучения модели? А. Высокая точность на обучающей выборке и низкая на тестовой Б. Низкая точность на обучающей выборке В. Высокая точность на всех выборках Г. Отсутствие зависимости между признаками	А	Проверка моделей.	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
30.	**Прочитайте текст и выберите верный ответ:** Укажите, какая задача относится к обучению с учителем? А. Кластеризация объектов Б. Классификация с использованием размеченных данных В. Поиск выбросов без меток Г. Сжатие данных	Б	Обучение с учителем. Задача классификации	7
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач				
31.	**Прочитайте текст вопроса и выберите правильный ответ**: Укажите, какой этап работы с информацией предполагает оценку ее достоверности и актуальности? А. Сбор информации Б. Критический анализ информации В. Хранение информации Г. Передача информации	Б	Обучение с учителем. Задача классификации	7
32.	**Прочитайте текст вопроса и выберите три правильных ответа:** Укажите меры защиты персональных и технологических данных? А. Использование паролей и разграничение доступа Б. Публикация данных В. Шифрование данных Г. Передача данных Д. Резервное копирование данных	А ,В ,Д	Информационная безопасность при работе с данными	7
33.	**Прочитайте текст вопроса и выберите пять правильных ответов:** Укажите, какие из перечисленных показателей относятся к описательной статистике А. Среднее значение Б. Дисперсия В. Стандартное отклонение Г. Проверка статистических гипотез	А, Б, В	Основы анализа данных	7
34.	**Прочитайте текст вопроса, выберите правильный ответ и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответа:**	В Причинно-следственный	Основы анализа данных	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
	Укажите, какой вывод соответствует причинно-следственному анализу данных? А. Температура связана с давлением Б. Рост давления наблюдается вместе с ростом температуры В. Повышение температуры приводит к увеличению давления в системе при прочих равных условиях (например, при постоянном объёме и количестве вещества) Г. Температура и давление изменяются в эксперименте	анализ устанавливает наличие причинной связи, а не только совместного изменения. Вариант В указывает направление влияния, контроль условий и позволяет интерпретировать зависимость как причинную.		
35.	**Прочитайте текст и дополните фразу:** Системный подход при анализе информации предполагает учет не только отдельных элементов, но и их _____.	взаимосвязей	Основы анализа данных	7
36.	**Прочитайте текст вопроса, выберите правильные ответы и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответов:** Укажите, какие действия относятся к этапу критического анализа информации? А. Сопоставление данных из разных источников Б. Оценка достоверности информации В. Выбор источников, подтверждающих исходную гипотезу Г. Выявление противоречий в данных	А, Б, Г Критический анализ информации включает сопоставление источников, оценку достоверности и выявление противоречий. Выбор данных под гипотезу может приводить к искажению результатов и не относится к критическому анализу.	ПО и Интернет-ресурсы по химическому анализу: спектральные базы данных и методики анализа	7
37.	**Прочитайте текст и дополните фразу:** Scopus представляет собой международную базу _____, используемую для поиска и анализа научной информации, а также для оценки публикационной активности.	научных публикаций	ПО и Интернет-ресурсы по химическому анализу: спектральные базы данных и методики анализа	7
38.	**Прочитайте текст и запишите развернутый ответ:** Опишите, в чем заключается различие между корреляционным и причинно-следственным анализом данных	Корреляционный анализ выявляет статистическую взаимосвязь между переменными без установления причинности, тогда как	Основы анализа данных	7

№ задания	Содержание задания	Ключ к ответу	Наименование темы РПД	Семестр
		причинно-следственный анализ направлен на выявление причинной зависимости, включая направление влияния и учет условий проведения анализа.		
39.	**Прочитайте текст вопроса и установите соответствие:** Сопоставьте виды анализа данных с их целями Виды анализа: А. Описательный анализ Б. Разведочный анализ В. Причинно-следственный анализ Г. Регрессионный анализ Цели: 1. Выявление причинных связей между переменными 2. Описание основных свойств и характеристик данных 3. Прогнозирование будущих значений 4. Поиск скрытых закономерностей без предварительных гипотез	А–2 Б–4 В–1 Г–3	Основы анализа данных	7
40.	**Прочитайте текст вопроса, выберите правильные ответы и запишите аргументы, обосновывающие выбор ответов:** Укажите, какие факторы необходимо учитывать при оценке достоверности научной информации? А. Репутация источника Б. Наличие ссылок на первоисточники В. Совпадение с личным мнением Г. Актуальность публикации Д. Объем текста	А, Б, Г	Электронные химические журналы. Патенты и патентные базы данных	7

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Максимальное количество баллов за семестр – 100.

Контрольная точка	Тема	Качество усвоения материала (текущий контроль). Максимальное количество баллов		Баллы по КТ (вес, %)
		лабораторные работы (отчет)[1]	Презентация[2]	
1. КТ 1	Введение в анализ данных и машинное обучение	12	-	12
2. КТ 2	Обработка инструментальных данных	12	10	22
3. КТ 3	Анализ многомерных данных, градуировочные и классификационные модели	8	20	28
4. КТ 4	Химические ресурсы по химическому анализу	8	20	28
Курсовая				10
	Итого	**40**	**60**	**100**

Критерии и шкала оценивания результатов изучения дисциплины на промежуточной аттестации (экзамен)

Оценка «отлично» выставляется студенту, если он получил оценки 4 или 5 по контрольным точкам и правильно, аргументировано ответил на все (три) вопросы билета на экзамене.
Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он получил оценки 4 или 3 по контрольным точкам и правильно, аргументировано ответил на два вопроса билета на экзамене.
Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он получил оценки 3 по контрольным точкам в семестре и правильно, аргументировано ответил на первый (теоретический) вопрос билета на экзамене.
Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он получил оценки ниже 3 по контрольным точкам и правильно ответил только на один вопрос или неправильно ответил на все вопросы билета на экзамене