

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Компьютерный дизайн новых материалов

Код модуля
1160263(1)

Модуль
Компьютерный дизайн новых материалов

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

| № п/п | Фамилия, имя, отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|-------------------------------|---|------------------|---|
| 1 | Болячкин Антон Сергеевич | кандидат физико-математических наук, без ученого звания | Доцент | Департамент фундаментальной и прикладной физики |

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

Авторы:

- **Болячкин Антон Сергеевич, Доцент, Департамент фундаментальной и прикладной физики**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Компьютерный дизайн новых материалов**

| | | | |
|----|---|--|---|
| 1. | Объем дисциплины в зачетных единицах | 3 | |
| 2. | Виды аудиторных занятий | Лекции Практические/семинарские занятия | |
| 3. | Промежуточная аттестация | Зачет | |
| 4. | Текущая аттестация | Контрольная работа | 1 |
| | | Домашняя работа | 4 |
| | | Научный доклад/доклад | 1 |

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Компьютерный дизайн новых материалов**

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

| Код и наименование компетенции | Планируемые результаты обучения (индикаторы) | Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине |
|--|--|--|
| 1 | 2 | 3 |
| ОПК-4 -Способен выбирать и использовать существующие информационно-коммуникационные технологии и вычислительные методы для решения задач в области профессиональной деятельности | Д-1 - Демонстрировать аналитические и системные умения, способность к поиску информации З-1 - Представлять возможности современных информационно-коммуникационных средств и технологий сбора, передачи, обработки и накопления информации, создания баз данных, используемых в области профессиональной деятельности У-1 - Выбирать и использовать современные ИТ-технологии и | Домашняя работа № 3 Зачет Контрольная работа Лекции Практические/семинарские занятия |

| | | |
|--|--|--|
| | базы данных при сборе, анализе, обработке и представлении информации для решения задач профессиональной деятельности | |
| ОПК-1 -Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков | <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> | <p>Домашняя работа № 1</p> <p>Домашняя работа № 2</p> <p>Зачет</p> <p>Лекции</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> |
| ПК-2 -Способен применять методы и средства планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований | <p>З-2 - Демонстрировать понимание методов и средств планирования и организации исследований и разработок</p> <p>П-1 - Анализировать и систематизировать научные данные, результаты экспериментов и наблюдений</p> | <p>Домашняя работа № 4</p> <p>Зачет</p> <p>Лекции</p> <p>Научный доклад/доклад</p> <p>Практические/семинарские занятия</p> |

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ (ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

| | | |
|--|---------------------------------|------------------------------|
| 1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.40 | | |
| Текущая аттестация на лекциях | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
| <i>Научные доклады</i> | 3,17 | 50 |
| <i>контрольная работа</i> | 3,16 | 50 |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.50 | | |
| Промежуточная аттестация по лекциям – зачет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.50 | | |
| 2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.60 | | |
| Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
| <i>Домашняя работа № 1</i> | 3,4 | 25 |
| <i>Домашняя работа № 2</i> | 3,8 | 25 |
| <i>Домашняя работа № 3</i> | 3,12 | 25 |
| <i>Домашняя работа № 4</i> | 3,16 | 25 |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям – 1.00 | | |
| Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – нет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрено | | |
| 3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – не предусмотрено | | |
| Текущая аттестация на лабораторных занятиях | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
| | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено | | |
| Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – нет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено | | |
| 4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий – не предусмотрено | | |
| Текущая аттестация на онлайн-занятиях | Сроки – семестр, | Максимальная оценка в баллах |

| | | |
|--|---------------------------|--|
| | учебная неделя | |
| Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено | | |
| Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет | | |
| Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено | | |

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

| Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта | Сроки – семестр, учебная неделя | Максимальная оценка в баллах |
|---|------------------------------------|---------------------------------|
| Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено | | |
| Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено | | |

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

| Результаты обучения | Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам |
|---------------------|--|
| Знания | Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью. |
| Умения | Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью. |
| Опыт /владение | Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов. |
| Другие результаты | Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения. |

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

| Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов) | | | | |
|---|--|---|------------|---|
| № п/п | Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание) | Шкала оценивания | | |
| | | Традиционная характеристика уровня | | Качественная характеристика уровня |
| 1. | Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет | Отлично (80-100 баллов) | Зачтено | Высокий (В) |
| 2. | Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения | Хорошо (60-79 баллов) | | Средний (С) |
| 3. | Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания | Удовлетворительно (40-59 баллов) | | Пороговый (П) |
| 4. | Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка | Неудовлетворительно (менее 40 баллов) | Не зачтено | Недостаточный (Н) |
| 5. | Результат обучения не достигнут, задание не выполнено | Недостаточно свидетельств для оценивания | | Нет результата |

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Основные понятия и обозначения. Основы языка программирования Python, библиотеки для работы с данными.
2. Основы машинного обучения.
3. Основы микромагнитного моделирования.

4. Машинное обучение в прикладных задачах.

Примерные задания

1. В чем заключается переобучение при машинном обучении? Перечислить способы борьбы с ним.

2. Записать пример функции потерь с регуляризацией.

3. В чем состоит суть модели Изинга в машинном обучении?

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа

Примерный перечень тем

1. Блок-схемы алгоритмов решения задач машинного обучения.

Примерные задания

Нарисовать блок-схему алгоритма стохастического градиентного спуска.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Домашняя работа № 1

Примерный перечень тем

1. Решающие деревья и их композиции.

Примерные задания

1. Для обученного алгоритма с оптимальными параметрами (или пользовательскими при `opt_TF = False`) добавить **вычисление средней абсолютной ошибки (MAE) и коэффициента R2**. Вывести эти значения на графике `predicted vs. experimental values`.
2. На данный момент деление выборки на тренировочную и тестовую подвыборки проходит случайным образом и контролируется числом `RS = 17`. Необходимо проанализировать, **как меняются результаты в зависимости от RS**. Для этого выполнить тренировку алгоритма для 10-ти разных `RS`, выводя каждый раз `MAE` и `R2`. Сделать выводы.
3. Метод градиентного бустинга и решающие деревья позволяют определить значимость разных признаков по отношению к предсказываемой характеристике (Feature Importance). **Необходимо научиться строить и оформлять график Feature Importance**, как это продемонстрировано на прикрепленной картинке. Для этого стоит изучить на сайте <https://scikit-learn.org/> раздел о Gradient Boosting Regression. Проанализировать влияние `RS` на значимость признаков.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.3. Домашняя работа № 2

Примерный перечень тем

1. Искусственные нейронные сети.

Примерные задания

1. Алгоритм LOWESS может быть эффективно использован для выявления и подавления выбросов. Модифицируйте TASK_2 следующим образом: пусть для некоторого числа точек y -значение домножается на большой коэффициент M (например, $M = 10$). Это будет имитировать выбросы в этих точках. **Проанализируйте, как меняется сглаженная зависимость $y_{est}(x)$ вблизи выбросов, варьируя число итераций алгоритма LOWESS.** Продемонстрируйте это на графике.
2. Как насчет автоматического выявления выбросов и исключения их из исходной зависимости $y(x)$? Для этого модифицируйте функцию `lowess` в файле `mylib.py` так, чтобы помимо значений `yest` она еще возвращала коэффициенты `delta`. Чем являются коэффициенты `delta`, каковы их значения для выбросов и остальных точек? **Реализуйте задумку с детектированием выбросов, используя `delta` (например, введите уровень дискриминации).** Проверить, все ли выбросы удалось обнаружить. Как изменится ситуация, если уменьшать коэффициент M ?
3. **Изучить настройку графиков в библиотеке `Plotly`:** добавить подписи осей, настроить размеры всех шрифтов, изменить положение легенды, изменить размер точек графика, добавить раскраску точек в зависимости от их y -значения (например, градиентное изменение цвета от красного для `max(y)` до синего цвета для `min(y)`).
4. На занятии, работая с `kNN`, мы зафиксировали число ближайших соседей (`n_neighbors = 7`). **Проанализировать, как меняются значения метрик `accuracy`, `precision`, `recall` и `F1` при постепенном увеличении числа ближайших соседей, начиная с минимально возможного значения.** Построить соответствующие графики и сделать выводы. Какие еще параметры имеет `KNeighborsClassifier` помимо `n_neighbors`?

Дополнительное задание для энтузиастов.

Функция `lowess` в файле `mylib.py` представляет собой локально-линейное сглаживание.

Попробовать поменять это на локально-постоянное сглаживание, т.е. локальную аппроксимацию константой. Сравнить, как меняется вид графиков. Попробуйте другие ядра для весовых коэффициентов w (см. `kernels.png`). Также выполнить сравнение графиков.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.4. Домашняя работа № 3

Примерный перечень тем

1. Метод опорных векторов.

Примерные задания

Цель работы - сравнить предсказания нейронной сети (NN) и градиентного бустинга (GBR).

1. К заданию прикреплен Python-скрипт, подготовленный на соответствующей практике по NN. Также пригодятся наработки с первой практики по GBR. Как для NN, так и для GBR нами были подобраны оптимальные гиперпараметры алгоритмов. Убедитесь самостоятельно, что параметры действительно оптимальны, расширив диапазон их комбинаторного поиска.
2. Далее с подобранными гиперпараметрами нужно создать и обучить NN и GBR на полном наборе данных (т.е. разбиение на обучающую и тестовую выборки уже не требуется). Рекомендуется сделать это в одном отдельном скрипте. В нем же **нужно построить зависимость целевой характеристики X от признака A, которая предсказывается NN и GBR**. Для этого сделать серию предсказаний для образцов, чей признаковый вектор составлен следующим образом:
 - признак A меняется от своего минимального значения в датасете до максимального с таким шагом, что получается не менее 100 точек в этом интервале;
 - все остальные признаки принимаются равными среднему значению в датасете.
3. Сравнить полученные зависимости. Каков характер зависимостей? Насколько стабильны зависимости, если слегка менять гиперпараметры алгоритмов? Как меняется зависимость для NN, если использовать в качестве активационной функции "tanh" вместо "relu"? Много ли образцов из датасета имеется в интервалах, где наблюдаются расхождения между NN и GBR? Какой интервал значений признака A выглядит наиболее статистически надежным?

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.5. Домашняя работа № 4

Примерный перечень тем

1. Понижение размерности и кластеризация.

Примерные задания

Для заданного датасета применить метод главных компонент (PCA). Сколько главных компонент достаточно для построения регрессора? Какие признаки наиболее значимы согласно PCA? Визуализовать датасет в 2D, используя PCA.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.6. Научный доклад/доклад

Примерный перечень тем

1. Применение ML в материаловедении.

Примерные задания

1. Применение машинного обучения для создания каталогов совпадений в астрофизике.
2. Применение машинного обучения на основе техники для автоматизации измерений изображений сканирующей электронной микроскопии.
3. Обзор модели Изинга для глубокого машинного обучения.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Зачет

Список примерных вопросов

1. Логические методы классификации.
2. Метрические и линейные методы классификации.
3. Метод опорных векторов и логистическая регрессия.
4. Метрики качества классификация.
5. Нейронные сети.
6. Кластеризация и визуализация.
7. Частичное обучение.
8. Машинное обучение в физике и материаловедении. Примеры успешной реализации.
9. Основы микромагнитного моделирования. Вклады в свободную энергию магнетика.
10. Композиции алгоритмов, градиентный бустинг.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.