

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1149500	Машинное обучение

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Прикладные математика и физика	Код ОП 1. 03.03.01/33.01
Направление подготовки 1. Прикладные математика и физика	Код направления и уровня подготовки 1. 03.03.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Машинное обучение

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает в себя три дисциплины «Введение в специальность», «Квантовое машинное обучение», «Машинное обучение для физиков». Курс «Введение в специальность» состоит из авторских лекций ведущих преподавателей кафедры и ученых института физики металлов УрО РАН, посвященных конкретным актуальным научным проблемам физики и материаловедения, решаемых с помощью современных численных методов и алгоритмов. В дисциплине "Квантовое машинное обучение" подробно рассматриваются математические основы технологий машинного обучения (формализм искусственных нейронных сетей, а также методы их "обучения": общие, т.е. сводящиеся к задаче на оптимизацию, и частные, например, метод обратного распространения ошибки). В данном научном контексте ключевая новая компетенция, на формирование которой нацелена дисциплина - это навыки применения технологий машинного обучения для численного решения спиновых и электронных квантовых Гамильтонианов, для которых стандартные подходы оказываются неприменимыми в силу ограниченности вычислительных ресурсов. Дисциплина "Машинное обучение для физиков" состоит из двух разделов, первый из которых служит введением в теорию машинного обучения, а второй нацелен на применение полученных знаний для решения актуальных задач современной физики. Рассматриваются как простейшие методы, так и нейронные сети различной структуры, а также сферы их применимости. Подробно изучаются алгоритмы оптимизации, включая перспективную методику частично контролируемого обучения, способы подбора подходящей структуры и параметров метода, нюансы, связанные с набором и предобработкой входных данных. В качестве объектов исследования выступает широкий спектр моделей классической и квантовой физики, включая ячеичную перколяцию, диффузионное движение и магнитные системы, описываемые гамильтонианами различной степени сложности.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Введение в специальность	2
2	Машинное обучение для физиков	8
3	Квантовое машинное обучение	4
ИТОГО по модулю:		14

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Введение в специальность	УК-11 - Способен принимать обоснованные экономические решения в различных областях жизнедеятельности	<p>З-1 - Объяснить принципы функционирования рыночной экономики и роль государства</p> <p>З-2 - Изложить правила рационального поведения экономических агентов как в условиях устойчивого развития, так и в периоды финансово-экономических кризисов</p> <p>З-3 - Характеризовать структуру личного бюджета и принципы его ведения с использованием финансовых инструментов</p> <p>З-4 - Обосновывать целесообразность финансового планирования</p> <p>У-1 - Критически оценивать информацию о последствиях экономической политики, перспективах экономического роста и развития экономики для принятия обоснованных экономических решений</p> <p>У-2 - Сравнить поведение экономических агентов в различных экономических ситуациях и обосновывать его целесообразность в соответствии с правилами</p> <p>У-3 - Анализировать структуру личного бюджета и определять направления его оптимизации с учетом экономической ситуации</p> <p>У-4 - Минимизировать индивидуальные финансовые риски, используя информацию о правах и обязанностях потребителя финансовых услуг и возможности финансовых инструментов</p> <p>П-1 - Самостоятельно или работая в команде разрабатывать рациональные решения в различных экономических</p>

		<p>ситуациях, ориентируясь на анализ информации о показателях устойчивого развития и в соответствии с правилами</p> <p>П-2 - Разрабатывать предложения по оптимизации структуры личного бюджета в различных экономических и финансовых ситуациях на основе анализа расходов и доходов, финансовых рисков и с учетом возможностей использования финансовых инструментов</p> <p>Д-1 - Демонстрирует развитую мотивацию учебной деятельности: настойчивость, увлеченность, трудолюбие</p> <p>Д-2 - Демонстрирует самостоятельность в поиске экономической информации, экономических решений; критическое мышление при оценке экономической ситуации, творческий подход к решению экономических задач</p> <p>Д-3 - Демонстрирует ответственное отношение к принятию экономических решений</p>
	<p>ОПК-6 - Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной формах в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание норм и правил русского и английского языка в применении к профилю деятельности</p> <p>У-1 - Грамотно формулировать результаты деятельности в профессиональной области на русском и английском языках в соответствии с нормами и правилами</p> <p>П-1 - Иметь опыт представления результатов научно-исследовательской /научно-технической работы на русском и английском языках в устной речи и письменных документах</p> <p>Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность к подготовке материалов научных исследований к публичному доступу</p>
	<p>ОПК-7 - Способен использовать основы экономических и правовых знаний в различных сферах</p>	<p>З-1 - Интерпретировать содержание основных источников правовой информации</p> <p>У-1 - Находить нормативно-правовые акты и юридические документы для использования в сфере профессиональной</p>

	<p>профессиональной деятельности</p>	<p>деятельности, определять способы и пути принятия решений на основе норм права</p> <p>У-2 - Определять способы и пути принятия решений в профессиональной деятельности с учетом требований экономической эффективности</p> <p>П-1 - Иметь опыт составления запросов для получения необходимой юридической информации и ответов на требования юридических служб</p> <p>П-2 - Иметь опыт оценки собственной профессиональной деятельности с точки зрения действующего законодательства в сфере экономики и показателей экономической эффективности</p>
	<p>ПК-5 - Способен понимать и применять методологии проектирования в области физики конденсированного состояния и материаловедения</p>	<p>З-1 - Изложить характеристики научно-производственного оборудования подразделения, правила его эксплуатации</p> <p>У-1 - Систематизировать информацию для решения поставленных научно-технических задач</p> <p>П-1 - Иметь практический опыт сбора и составления научно-технической и другой служебной документации</p>
Квантовое машинное обучение	<p>ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>З-1 - Сравнить возможности различных современных программных средств для сбора, передачи, обработки и накопления информации</p> <p>У-1 - Осуществлять выбор адекватного программного обеспечения при решении задач по профилю деятельности</p> <p>П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных</p> <p>Д-1 - Демонстрировать развитие компетенций в области ИТ</p>
	<p>ПК-1 - Способен планировать и проводить научные эксперименты в области физики конденсированного состояния и (или) теоретические</p>	<p>З-1 - Изложить цели и задачи производимых исследований</p> <p>У-1 - Анализировать причины возникающих погрешностей в расчетных и экспериментальных данных</p>

	(аналитические и компьютерные) исследования	П-1 - Иметь практический опыт применения различных методов физических исследований в избранной предметной области: экспериментальных методов, статистических методов обработки экспериментальных данных, методов теоретической физики, вычислительных методов, современных методов математического и компьютерного моделирования объектов и процессов
Машинное обучение для физиков	ОПК-2 - Способен проводить под научным руководством исследования на основе современных методов в конкретной области профессиональной деятельности	З-1 - Демонстрировать понимание теоретических основ методов, используемых для проведения научных исследований в профильной области У-1 - Соотносить цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств П-1 - Иметь опыт выполнения стандартных исследований с использованием серийного научного и технологического оборудования, стандартной методологии и методов исследований Д-1 - Проявлять ответственность за проводимые исследования
	ПК-2 - Способен выбирать и применять подходящее оборудование, методы исследований и алгоритмы для решения задач в области физики конденсированного состояния	З-3 - Дать обзор методов и средств проектирования программного обеспечения У-1 - Выбирать типовые решения и шаблоны разработки программного обеспечения с учетом специфики исследовательской задачи П-1 - Иметь практический опыт проведения экспериментальных исследований, выполнения проектов и заданий по тематике разрабатываемой научной проблемы

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Введение в специальность

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико- математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Особенности образовательной программы «Прикладные математика и физика»	Образовательная программа 03.03.01 Прикладные математика и физика направлена на подготовку научных и инженерно-технических работников, способных организовать деятельность научных коллективов и наукоемких предприятий. Особенностью программы является выраженная научная ориентированность процесса обучения. Направление ориентировано на подготовку высококвалифицированных специалистов, способных разрабатывать физические и математические модели, алгоритмы и программы для решения физико-технических и естественнонаучных задач, возникающих при разработке новых наукоемких технологий. Увеличенный объем научно-исследовательской работы дает возможность обучающимся последовательно овладеть необходимым уровнем квалификации, начиная с профессий лаборанта, обеспечивает включение выпускников в научный процесс без дополнительного переобучения. Программа предполагает фундаментальную подготовку по естественнонаучным и компьютерным дисциплинам достаточную для продолжения обучения по программам естественно-научной магистратуры.
P2	Поиск новых двумерных магнитных материалов	Ключевой тренд в техническом прогрессе сегодняшнего дня - миниатюризация, экологичность и энергоэффективность. Все

	<p>средствами современной теоретической физики.</p>	<p>это ставит задачи перевода функционала стандартных и хорошо известных электронных компонентов - транзисторов, датчиков - на фундамент квантовых степеней свободы отдельных частиц и их низкоразмерных агломератов.</p> <p>Одно из наиболее развитых в науке и индустрии областей является синтез тонких и сверхтонких (толщиной в несколько атомных слоев) плёнок. Такие плёнки обладают очень высокой чувствительностью ко внешним условиям (например, электрическому или магнитному полю), что и оправдывает их перспективность.</p> <p>Особым случаем является класс магнитных плёнок. Наличие в такой системе магнитного порядка всегда является результатом совместного действия конкурирующих физических механизмов - иногда понятных и хорошо изученных физиками, а иногда - едва ли подводимыми под известные модели.</p> <p>Поэтому сегодня таких плёнок синтезировано очень мало, и на теоретическую науку возлагается большая надежда на модельном уровне организовать поиск структуры новых магнитных плёнок, а также сформулировать условия их практического синтеза. Для этого мы развиваем подходы для осуществления численного поиска таких конфигураций, которые "подсвечивали" бы особые механизмы межэлектронного взаимодействия, приводящие к стимулированию двумерного материала формировать дальний магнитный порядок.</p>
P3	<p>Новые материалы и эффекты в физике конденсированного состояния</p>	<p>Будут описаны физические свойства материалов и систем, активно исследуемых в современной физике конденсированного состояния.</p> <p>Это сверхпроводники, в которых высокие критические температуры достигаются при сверхвысоких давлениях, низкоразмерные магнитные системы, которые могут быть использованы в электронике и спинтронике, соединения с сильной взаимосвязью между различными степенями свободы (электронные, спиновые, решеточные и орбитальные), топологические изоляторы и полуметаллы, а также новые материалы, существующие только при больших давлениях.</p>
P4	<p>Компьютерное моделирование новых магнитных и оптических материалов: теоретические методы из первых принципов</p>	<p>Краткая история развития теории функционала плотности и теоретических методов для компьютерного моделирования свойств материалов из первых принципов. Современные методы функционала плотности, их возможности и недостатки. Предсказание стабильности и физических свойств труднодоступных или недоступных материалов. Реализация компьютерного моделирования на базе высокопроизводительных вычислительных кластеров. Примеры практических применений методов для вычисления физических свойств новых магнитных и оптических материалов.</p>
P5	<p>Машинное обучение</p>	<p>Исследование фазовых диаграмм различных систем является важной задачей в физике конденсированного состояния. Даже если параметр порядка известен, определение фазовых границ</p>

		<p>традиционными методами может требовать гигантских вычислительных затрат. Ситуация еще более усложняется в случае, когда такой параметр неизвестен, либо переход имеет нестандартную природу (к примеру, в случае топологических фаз).</p> <p>Способность алгоритмов машинного обучения выявлять сложную структуру в данных помогла добиться существенного прогресса в данной области.</p> <p>В данном разделе будет рассмотрено построение магнитных фазовых диаграмм в моделях Изинга, Гейзенберга, а также при наличии анизотропного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Кроме этого, будет затронут алгоритм определения фазовых переходов на основе анализа ошибки нейронной сети.</p>
Р6	Квантовые вычисления и компьютеры	<p>Основы квантовой механики: математическое описание состояния квантовой системы, принцип суперпозиции. Линейные операторы. Сравнение классических и квантовых компьютеров. Проблемы и ограничения классических компьютеров. Структура квантовых программ (цепей). Квантовое превосходство. Облачные сервисы, предоставляющие доступ к квантовым компьютерам. Примеры квантовых алгоритмов. Области применения квантовых вычислений. Применение квантовых компьютеров в ФКС: вариационный принцип, эволюционный подход Троттера-Сузуки. Ограничения, присущие квантовым компьютерам</p>
Р7	Магнито-резонансные методы	<p>Представлена элементарная теория магнитного резонанса и описаны возможности его применения в области материаловедения, химии, биологии, медицины и геофизики. В частности, внимание уделяется магнитометрии слабых магнитных полей, имеющих важное значение в геологоразведке, физике Земли, археологии, навигации и т. д. Также проводится обзор современных методов и аппаратуры магниторезонансной спектроскопии и релаксометрии, активно применяющихся в различных отраслях физики и химии при изучении внутриатомных, внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приводятся примеры применения спектроскопии в дозиметрии, структурных исследованиях, изучении динамических процессов, включая химические и биохимические реакции. Изложены основы магнито-резонансной томографии, ставшей неотъемлемой составляющей современной медицинской диагностики и биофизических исследований. Демонстрируется как ЯМР-томография позволяет неразрушающим и безвредным образом изучать морфологию и свойства биологических объектов, в том числе протекающие в них процессы, например течение крови, развитие различных патологий тканей и т. п. Также представлены принципы работы и возможности аппаратура для бесконтактных МРТ-исследований твердых материалов и геологических пород.</p>

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология самостоятельной работы	ОПК-6 - Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной формах в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	Д-2 - Проявлять внимательность и ответственность к подготовке материалов научных исследований к публичному доступу

1.4. Программа дисциплины реализуется .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение в специальность

Электронные ресурсы (издания)

1. Смолин, Д. В.; Введение в искусственный интеллект : конспект лекций.; Физматлит, Москва; 2007; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=76617> (Электронное издание)
2. Столяров, Р. А.; Нанюглеродные функциональные материалы и покрытия: учебное электронное издание : учебное пособие.; ФГБОУ ВПО "ТГТУ", Тамбов; 2018; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=570540> (Электронное издание)
3. Шень, А. Х.; Классические и квантовые вычисления : курс.; Интернет-Университет Информационных Технологий, Москва; 2007; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=234673> (Электронное издание)
4. Мазалова, В. Л.; Нанокластеры: рентгеноспектральные исследования и компьютерное моделирование : монография.; Физматлит, Москва; 2012; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=275555> (Электронное издание)
5. Заводинский, В. Г.; Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем; Физматлит, Москва; 2013; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457710> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Рассел, Рассел С., Норвиг, Норвиг П., Птицын, К. А.; Искусственный интеллект. Современный подход; Вильямс, Москва ; СПб. ; Киев; 2006 (1 экз.)
2. Ефимов, Н. Н.; Основы информатики. Введение в искусственный интеллект; Издательство Московского государственного университета, Москва; 1991 (1 экз.)
3. Поспелов, Г. С.; Искусственный интеллект - основа новой информационной технологии; Наука, Москва; 1988 (2 экз.)

4. ; Новые конструкционные и функциональные материалы и возможности их более широкого применения; Политехника, Санкт-Петербург; 1992 (1 экз.)
5. Углов, В. В.; Современные функциональные материалы : [пособие для студентов вузов].; БГУ, Минск; 2020 (1 экз.)
6. , Боуместер, Д., Кулик, С. П., Цайлингер, А., Шапиро, Е. А., Экерт, А.; Физика квантовой информации. Квантовая криптография. Квантовая телепортация. Квантовые вычисления; Постмаркет, Москва; 2002 (7 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Государственная публичная научно-техническая библиотека

<http://www.gpntb.ru>

2. Российская национальная библиотека

<http://www.rsl.ru>

3. Публичная электронная библиотека

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

V. Kashin, V. V. Mazurenko, M. I. Katsnelson, A. N. Rudenko, 2D Mater. 7 025036 (2020)

Dupé, B., Hoffmann, M., Paillard, C. et al. Tailoring magnetic skyrmions in ultra-thin transition metal films. Nat Commun 5, 4030 (2014). <https://doi.org/10.1038/ncomms5030>

Sohn, B., Lee, E., Park, S.Y. et al. Sign-tunable anomalous Hall effect induced by two-dimensional symmetry-protected nodal structures in ferromagnetic perovskite thin films. Nat. Mater. (2021). <https://doi.org/10.1038/s41563-021-01101-4>

Перри, Райли. Элементарное введение в квантовые вычисления. Пер. с англ.: Учебное пособие / Р. Перри - Долгопрудный: издательский дом "Интеллект", 2015. - 208 с. ISBN 978-5-91559-165-2

P. J. J. O'Malley et al. Phys. Rev. X 6, 031007 (2016)

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение в специальность

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство	Не требуется

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Машинное обучение для физиков

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Владимирович	доктор физико-математических наук, доцент	Заведующий кафедрой	теоретической физики и прикладной математики
2	Яковлев Илья Александрович	без степени, без звания	инженер	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Владимирович, Заведующий кафедрой, теоретической физики и прикладной математики
- Яковлев Илья Александрович, инженер, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Базовые понятия теории машинного обучения и математической статистики	Базовые формулы статистики. Описание случай-ной величины на основе ее математического ожидания и дисперсии. Корреляция и ковариация, доверительные интервалы. Вероятность и правдоподобие, поиск оптимальных параметров распределения на основе алгоритма максимизации правдоподобия. Классификация алгоритмов машинного обучения, основные типы решаемых задач и способы настройки параметров. Предварительная обработка данных. Стандартизация и алгоритмы семплирования.
P2	Алгоритмы, обучающиеся с учителем	Линейная регрессия, оптимизация параметров методом наименьших квадратов. Основная область применения алгоритма и ограничения. Модификация регрессии добавлением регуляризационного члена, накладывающего ограничения на коэффициенты. Полиномиальная регрессия, описание не-линейной динамики системы. Регрессия Хьюбера, учет выбросов и ошибок в данных. Классификация данных на основе логистической регрессии.

		<p>Метод опорных векторов. Случаи линейной разделимости и не разделимости данных. Переход в спрямляющее пространство, ядро преобразования. Связь метода с простейшей нейронной сетью.</p> <p>Методы ближайших соседей. Определение ближайших соседей при помощи перебора и построения деревьев. Область применения данных алгоритмов и их ограничения. Метод K-ближайших соседей в задачах классификации и регрессии. Классификация на основе центроид. Переход от Евклидовой метрики к более эффективной при помощи алгоритма Neighborhood Components Analysis.</p> <p>Деревья решений. Особенности построения деревьев для различного типа входных данных.</p> <p>Методы ансамблей. Случайный лес и классификация на основе голосования. Adaptive Boosting и Gradient Boosting алгоритмы, особенности их обучения и область применимости.</p>
Р3	Алгоритмы, обучающиеся без учителя	<p>Снижение размерности данных. Анализ главных компонент на основе диагонализации ковариационной матрицы и сингулярного разложения, простой итерационный алгоритм. Оценка доли сохраненной информации при переходе в новое пространство.</p> <p>Низкоразмерная визуализация данных при помощи алгоритма t-SNE, важные параметры метода и описание получаемых результатов. Расстояние Кульбака-Лейблера.</p> <p>Кластеризация данных. Алгоритм K-средних, особенности работы и обучения. Метод сдвига среднего, как модификация на случай неизвестного количества кластеров в данных. Алгоритмы, основанные на анализе плотности данных и не делающие предположение об изотропной структуре кластеров.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе сравнения полученных меток с исходными. Индекс Рэнда, взаимная информация, однородность, полнота и V-мера.</p> <p>Оценка качества кластеризации на основе анализа структуры данных. Коэффициент Силуэта, индекс Калински-Харабаса, индекс Дэвиса-Болдина.</p>
Р4	Нейронные сети	<p>Базовые понятия. Нейрон, синапс, функция активации, входные и выходные данные, функция потерь. Типы функций активации, советы по их использованию. Обзор существующих архитектур.</p> <p>Обзор исторически важных архитектур нейронных сетей. Перцептрон, особенности работы и аппаратная реализация. Алгоритм коррекции ошибки, теорема сходимости перцептрона. Обучение на примере логической функции XOR. Нейронная сеть Хопфилда, структура, особенности работы, обучение. Восстановление поврежденных образов. Предел</p>

		<p>памяти сети. Нейронная сеть Кохонена, примеры использования, геометрическая интерпретация.</p> <p>Нейронная сеть прямого распространения, предназначение и принципы работы. Алгоритм обратного распространения ошибки, стохастический градиентный спуск, скорость обучения и момент. Определение параметров оптимизационной процедуры на основе перекрестной проверки.</p> <p>Сверточная нейронная сеть. История исследования зрительной зоны головного мозга. Основные понятия: фильтр, карта признаков, рецептивное поле, свертка, подвыборка. Структура сети и принципы ее работы. Некоторые стандартные фильтры: определение границ, размытие, повышение резкости. Модификация метода обратного распространения ошибки.</p> <p>Рекуррентные нейронные сети. Базовая архитектура и принципы работы. Особенности алгоритма обратного распространения ошибки во времени и вытекающие ограничения на размер сети. Ячейки долгой краткосрочной памяти (LSTM) и управляемые рекуррентные блоки (GRU) для сохранения памяти сети об отдаленных событиях в прошлом.</p> <p>Ограниченная машина Больцмана. Особенности архитектуры, кодирование распределения вероятности входных данных при помощи параметров сети. Процесс обучения в случае входных векторов с бинарными коэффициентами.</p> <p>Автоэнкодеры. Латентное представление данных. Вариационные автоэнкодеры. Предварительная оптимизация модели при помощи ограниченной машины Больцмана.</p> <p>Тренировка нейронных сетей на основе обучения с подкреплением. Базовые алгоритмы и использование в теории игр.</p>
<p>P5</p>	<p>Анализ физических систем при помощи алгоритмов машинного обучения</p>	<p>Частичное обучение с учителем. Алгоритмы автоматической маркировки данных обучающего набора на основе наличия небольшого числа образцов, класс которых изначально известен.</p> <p>Восстановление уравнений движения частицы по имеющимся данным о ее траектории. Особенности выбора системы отсчета и метода оптимизации.</p> <p>Построение магнитных фазовых диаграмм в модели Изинга, Гейзенберга, а также при наличии анизотропного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Определение фазовых переходов на основе анализа ошибки нейронной сети.</p> <p>Классификация динамических процессов, вызванных пикосекундными импульсами электромагнитного поля. Моделирование спиновой динамики системы.</p> <p>Использование автоэнкодеров для получения основной информации о системе, предсказание поведения при изменении параметров.</p>

		<p>Восстановление волновой функции квантовых спиновых гамильтонианов.</p> <p>Предсказание магнитных параметров соединения по кристаллографическим данным. Моделирование структуры материала, обладающего необходимыми параметрами.</p> <p>Нахождение атомных потенциалов и моделирование функционала электронной плотности. Определение энергии молекулярной атомизации.</p> <p>Моделирование логических функций на системе наночастиц золота. Особенности генетических алгоритмов оптимизации.</p>
Р6	Аппаратная реализация нейронных сетей	<p>Промышленная реализация нейронных сетей. Чипы ibm Synapse, intel LOIH1, intel Pohoiki Beach. Структура, принципы работы и применение.</p> <p>Специфические реализации нейросетей: на основе когерентных нанофотонных схем и памяти с изменяемым фазовым состоянием.</p> <p>Реализация нейронной сети на квантовом компьютере.</p>

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология самостоятельной работы	ОПК-2 - Способен проводить под научным руководством исследования на основе современных методов в конкретной области профессиональной деятельности	Д-1 - Проявлять ответственность за проводимые исследования

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Машинное обучение для физиков

Электронные ресурсы (издания)

1. Ашкрофт, Н., Н.; Физика твердого тела; Мир, Москва; 1979; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=483336> (Электронное издание)

2. Гордиенко, А. Б.; Физика конденсированного состояния. Решение задач : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2011; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232487> (Электронное издание)
3. Гладков, Л. А., Курейчик, В. М.; Генетические алгоритмы : учебник.; Физматлит, Москва; 2010; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68417> (Электронное издание)
4. Трахтенброт, Б. А.; Алгоритмы и машинное решение задач : научно-популярное издание.; Гос. изд-во техн.-теорет. лит., Москва; 1957; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228179> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Ашкрофт, Н., Мермин, Н., Михайлов, А. С., Каганов, М. И.; Физика твердого тела Т. 1 / пер. с англ. А. С. Михайлова под ред. М. И. Каганова. ; Мир, Москва; 1979 (4 экз.)
2. Ашкрофт, Н.; Физика твердого тела: В 2 т. Т. 1. ; Мир, Москва; 1979 (33 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

scikit-learn <https://scikit-learn.org/stable/>

Keras <https://keras.io/>

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Machine Learning: A Probabilistic Perspective (Adaptive Computation and Machine Learning Series) / Murphy, Kevin P. MIT Press. 2014

Encyclopedia of Machine Learning and Data Mining / Sammut. Springer. 2016

П. Флах. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases / Peter A. Flach; Tijl Bie; Nello Cristianini. Springer Berlin Heidelberg. 2012 10

An introduction to statistical learning: with applications in R / G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani. – New York: Springer, 2013. – 426 с.

Data Analysis, Machine Learning and Knowledge Discovery / Spiliopoulou, Myra; Janning, Ruth; Schmidt-Thieme, Lars; Gesellschaft für Klassifikation. Springer International Publishing. 2014

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Машинное обучение для физиков

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p>	Не требуется
2	Практические занятия	<p>Периферийное устройство</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Квантовое машинное обучение

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Мазуренко Владимир Гаврилович	доктор физико-математических наук, профессор	Профессор	теоретической физики и прикладной математики
2	Яковлев Илья Александрович	без степени, без звания	инженер	теоретической физики и прикладной математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института Физико-технологический

Протокол № 10 от 11.06.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Мазуренко Владимир Гаврилович, Профессор, теоретической физики и прикладной математики
- Яковлев Илья Александрович, инженер, теоретической физики и прикладной математики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Введение	Данные и наука о них. Машинное обучение и нейронные сети. Значимость их изучения и применения сегодня.
P2	Математика и отношение математики к физике	Введение в общую методологию и теорию систем. Математические модели и принцип их применения. Методологическое соотношение бесконечно малой величины и конечного приращения. Аддитивность и неаддитивность системы. Методологическое сходство математики и квантовой механики.
P3	Основные сведения о квантовой механике.	Соотношение волновой и корпускулярной модели вещества и излучения. Интерпретация неопределенности Гейзенберга на уровне неаддитивности материи и пространства. Критерий полноты. Физическая интерпретация аппарата операторной алгебры.
P4	Элементы квантовой теории твёрдого тела.	Методологическая основа физического приближения. Соотношение понятий "взаимодействие" и "скоррелированность". Адиабатическое приближение. Эффективное электронное взаимодействие. Детерминант Слэтера. Эффективное среднее поле и самосогласованность теоретического подхода к описанию квантового твёрдого тела.

		<p>Учёт кристаллической структуры. Теорема Блоха. Прямое и обратное пространства. Решётка Браве и зоны Бриллюэна. Квазиимпульс электронов в кристалле.</p> <p>Методологическая основа физического приближения. Соотношение понятий "взаимодействие" и "скоррелированность". Адиабатическое приближение. Эффективное электронное взаимодействие. Детерминант Слэтера. Эффективное среднее поле и самосогласованность теоретического подхода к описанию квантового твёрдого тела. Учёт кристаллической структуры. Теорема Блоха. Прямое и обратное пространства. Решётка Браве и зоны Бриллюэна. Квазиимпульс электронов в кристалле.</p>
P5	Модельные подходы к квантовому описанию твёрдого тела.	<p>Модель Хаббарда. Внутриаомное кулоновское и обменное взаимодействие. Базис чисел заполнения. Учёт фермионной симметрии. Модель Гейзенберга. Изотропное и анизотропное межатомное обменное взаимодействие. Базис "чистых" спиновых состояний.</p>
P6	Базовые сведения об нейросетях.	<p>Биологические предпосылки построения моделей нейронных сетей. Модельный образ нейронов и синапсов. Принцип "обучения". Нейрон смещения. Матричный аппарат для расчёта отклика нейронных сетей.</p> <p>Введение в математические основы искусственного интеллекта.</p>
P7	Общие сведения об "обучении" нейросетей.	<p>Математическая репрезентация "обучения" нейросети в качестве задачи оптимизации. Метод золотого сечения. Методы на основе градиента оптимизируемой функции (градиентный спуск и сопряжённые градиенты).</p>
P8	Алгоритма оптимизации без участия градиента функции.	<p>Метод Монте-Карло. Генетический алгоритм оптимизации.</p>
P9	Специализированные алгоритмы "обучения" нейросети.	<p>Метод обратного распространения ошибки для нейросетей прямого распространения. Ограниченная машина Больцмана. Стохастический нейрон. Принцип "обучения" ограниченной машины Больцмана.</p>
P10	Постановка квантовой физической задачи для нейросети.	<p>Полная диагонализация матрицы гамильтониана и фундаментальное ограничение такого подхода. Частичная диагонализация методом Ланцоша. Вариационный принцип квантовой механики. Методы оценки энергии квантового состояния (прямой стохастический метод, метод вариационного Монте-Карло).</p>
P11	Принцип применения нейронных сетей в квантовых задачах.	<p>Представление Гильбертова пространства в формализме нейронных сетей. Обучение нейросети как оптимизация функции энергии физической системы.</p>

P12	Научные результаты в области применения машинного обучения для квантовых задач.	Специфика применения ограниченной машины Больцмана для расчёта модели Гейзенберга. Специфика применения нейросетей прямого распространения для расчёта свойств модели Бозе-Хаббарда. Методы AdaGrad и Adam для оптимизации функции энергии.
P13	Квантовая томография.	Основные принципы реконструкции квантового состояния на классическом компьютере. Проблема выбора набора базисов и наблюдаемых для измерений. Фундаментальные ограничения квантовой томографии. Использование нейроквантовых состояний в томографии. Метод классической тени для характеристики квантовых состояний.
P14	Низкоразмерная визуализация и кластеризация квантовых состояний.	Методы классификации и сертификации волновых функций. Фазовые переходы в квантовых системах.
P15	Квантовое машинное обучение.	Квантовая формулировка базовых подходов машинного обучения: метод главных компонент, метод опорных векторов и др. Квантовые автокодировщики. Обучение и применение.
P16	Перспективы, выводы и заключение.	

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Таблица 1.2

Направление воспитательной деятельности	Вид воспитательной деятельности	Технология воспитательной деятельности	Компетенция	Результаты обучения
Профессиональное воспитание	учебно-исследовательская, научно-исследовательская	Технология самостоятельной работы	ОПК-5 - Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности	П-2 - Иметь опыт решения задач профессиональной деятельности с использованием современных информационных баз данных

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовое машинное обучение

Электронные ресурсы (издания)

1. Барский, А. Б.; Логические нейронные сети : учебное пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ)|Бином. Лаборатория знаний, Москва; 2007; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232983> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 1. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)
2. Коэн-Таннуджи, К., Диу, Б., Лалоз, Ф., Новиков, Л. Н.; Квантовая механика : в 2 т. Т. 2. ; УрГУ, Екатеринбург; 2000 (85 экз.)
3. Вонсовский, С. В., Кацнельсон, М. И.; Квантовая физика твердого тела; Наука, Москва; 1983 (11 экз.)
4. Яхьяева, Г. Э.; Нечеткие множества и нейронные сети : учеб. пособие.; Интернет-Университет Информационных Технологий : БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2006 (1 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Chen G. et al. Learning Music Emotions via Quantum Convolutional Neural Network //International Conference on Brain Informatics. – Springer, Cham, 2017. – С. 49-58.
2. А.И. Иванов. Численная оценка показателей квантовой сцепленности выходных кубитнейросетевой молекулы преобразователя биометрических данных [Электронный ресурс] : учебное пособие. Пенза [2018]. – Издательство АО «Пензенский научно-исследовательский электротехнический институт» (АО «ПНИЭИ») – 27 с. Свободный доступ: <http://пниэи.рф/activity/science/noc/BOOK18-2.pdf>.
3. Zhang H. et al. mixup: Beyond empirical risk minimization //arXiv preprint arXiv:1710.09412. – 2017.
4. Inoue H. Data augmentation by pairing samples for images classification //arXiv preprint arXiv:1801.02929. – 2018.
5. Tokozume Y., Ushiku Y., Harada T. Between-class learning for image classification //Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. – 2018. – С. 5486-5494.
6. Guo H., Mao Y., Zhang R. MixUp as Locally Linear Out-Of-Manifold Regularization //arXiv preprint arXiv:1809.02499. – 2018.
7. Verma V. et al. Manifold Mixup: Learning Better Representations by Interpolating Hidden States. – 2018.
8. Schuld M., Petruccione F. Supervised Learning with Quantum Computers. – Springer, 2018. DOI 10.1007/978-3-319-96424-9 URL: <https://link.springer.com/book/10.1007%2F978-3-319-96424-9>
9. P.Wittek Quantum Machine Learning: What Quantum Computing Means to Data Mining [Electronic resource] / Peter Wittek // Academic Press, preprint. - 2014. -199p.URL:

https://www.researchgate.net/publication/264825604_Quantum_Machine_Learning_What_Quantum_Computing_Means_to_Data_Mining.

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

N. H. Bshouty and J. C. Jackson. Learning DNF over the uniform distribution using a quantum example oracle. *SIAM Journal on Computing*, 28(3):1136–1153, 1999. Earlier version in COLT'95.

E. Aïmeur, G. Brassard, and S. Gambs. Machine learning in a quantum world. In *Proceedings of Advances in Artificial Intelligence, 19th Conference of the Canadian Society for Computational Studies of Intelligence*, volume 4013 of *Lecture Notes in Artificial Intelligence*, pages 431–442, 2006.

[Эсма Эмер, Жиль Брассар и Себастьян Гамбс. «Квантовое ускорение для обучения без учителя». В: *Машинное обучение 90.2* (2013), стр. 261–287.

F Albarrán-Arriagada et al. «Обучение подкреплению для полуавтономного приближенного квантового решателя». В: *Машинное обучение: наука и технологии 1.1* (2020), стр. 15002.

Франсиско Альбарран-Арриагада и др. «Протокол адаптации на основе измерений с обучением квантовому подкреплению». В: *Physical Review A* 98.4 (2018), стр. 42315.

Луи-Франсуа Арсено и др. «Машинное обучение для физики многих тел: пример примесной модели Андерсона». В: *Physical Review B* 90.15 (2014), стр. 155136.

Марчелло Бенедетти и др. «Оценка эффективных температур в квантовых отжигателях для приложений отбора проб: тематическое исследование с возможными приложениями в глубоком обучении». В кн. : *Phys. Ред. А* 94 (2 августа 2016 г.), стр. 022308. DOI: 10.1103 / PhysRevA.94.022308 . URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.94.022308> .

Kaoutar Benlamine et al. «Оценка расстояний для кластеризации на основе квантовых прототипов». В: *Международная конференция по обработке нейронной информации* . 2019. С. 561–572.

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовое машинное обучение

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения.
-------	--------------	---	--

			Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p>	Не требуется
2	Практические занятия	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> <p>Matlab R2008a</p>