

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ БИОМЕДИЦИНЫ
КАФЕДРА ЛАЗЕРНЫХ МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

ОДОБРЕНО НТС ИФИБ

Протокол № 5/25
от 18.11.2025

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В
СПЕКТРОСКОПИИ**

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.05.02 Фундаментальная и прикладная физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/ В	СРС, час.	KCP, час.	Форма(ы) контроля, экз./зач./КР/КП
10	2	72	0	45	0		27	0	3
Итого	2	72	0	45	0	15	27	0	

АННОТАЦИЯ

Целью освоения учебной дисциплины «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» является формирование у студентов знаний о методах постобработки спектральных данных (в частности, спектров поглощения, флуоресценции, диффузного отражения), а также статистическом анализе определяемых по спектральным зависимостям характеристик. Также курс включает в себя основы машинного обучения. Студент должен в результате прохождения курса уметь проводить постобработку спектров с целью повышения дешифровочных свойств полученных *in vivo* спектров, осуществлять декомпозицию спектров флуоресценции, поглощения и диффузного отражения на компоненты и вычисление на их основе набора характеристик, использовать различные инструменты математической статистики для описания наборов данных, получаемых в результате спектрального анализа, обнаружения статистически значимых различий между экспериментальными группами, классификации полученных данных с помощью методов машинного обучения.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения учебной дисциплины «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» является формирование у студентов знаний о методах постобработки спектральных данных (в частности, спектров поглощения, флуоресценции, диффузного отражения), а также статистическом анализе определяемых по спектральным зависимостям характеристик. Также курс включает в себя основы машинного обучения. Студент должен в результате прохождения курса уметь проводить постобработку спектров с целью повышения дешифровочных свойств полученных *in vivo* спектров, осуществлять декомпозицию спектров флуоресценции, поглощения и диффузного отражения на компоненты и вычисление на их основе набора характеристик, использовать различные инструменты математической статистики для описания наборов данных, получаемых в результате спектрального анализа, обнаружения статистически значимых различий между экспериментальными группами, классификации полученных данных с помощью методов машинного обучения.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Содержание программы «Методы машинного обучения и искусственного интеллекта в спектроскопии» имеет междисциплинарный характер и затрагивает такие области знания как оптика, спектроскопия, физика твердого тела, биология, физиология, коллоидная химия и нанотехнологии.

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной литературой, в том числе с использованием информационных технологий, отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области - выбор методов, современной аппаратуры и информационных технологий для проведения исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований	физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации, физические явления и процессы, физические, инженерно-физические, биофизические технологии, методы, приборы, устройства	ПК-3 [1] - Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011	3-ПК-3 [1] - знать методы проведения научных исследований и выполнения опытно-конструкторских работ в области физики У-ПК-3 [1] - уметь самостоятельно формулировать цели, ставить задачи научных исследований в своей профессиональной сфере; решать физические задачи с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта В-ПК-3 [1] - владеть навыками работы на современной аппаратуре, оборудовании; навыками использования информационных технологий в своей профессиональной области
- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной	физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации,	ПК-1.2 [1] - Способен применять на практике знания лазерной физики, физики полупроводников,	3-ПК-1.2 [1] - Знать законы и принципы физики твердого тела, оптики, взаимодействия

<p>литературой, в том числе с использованием информационных технологий, отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области - выбор методов, современной аппаратуры и информационных технологий для проведения исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований</p>	<p>физические явления и процессы, физические, инженерно-физические, биофизические технологии, методы, приборы, устройства</p>	<p>оптики, физических основ взаимодействия излучения с веществом для качественного и количественного описания исследуемых объектов и явлений</p> <p><i>Основание:</i> Профессиональный стандарт 40.039, 40.037, 40.006</p>	<p>излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики У-ПК-1.2 [1] - Уметь формулировать, выделять, анализировать исходные данные об исследуемом объекте и явлении, исходя из законов и принципов физики твердого тела, оптики, взаимодействия излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики В-ПК-1.2 [1] - Владеть приемами и методами, используемыми в области физики твердого тела, оптики, взаимодействия излучения с веществом, квантовой механики, лазерной физики, для качественного и количественного описания исследуемых объектов и явлений</p>
<p>- выявление актуальных проблем и тенденций в области физики - работа с научной литературой, в том числе с использованием информационных технологий, отслеживание отечественных и зарубежных работ в исследуемой области - выбор методов, современной</p>	<p>физические объекты и системы различного масштаба, уровня организации, физические явления и процессы, физические, инженерно-физические, биофизические технологии, методы, приборы, устройства</p>	<p>ПК-1.3 [1] - Способен ставить и решать теоретические и экспериментальные задачи в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом</p> <p><i>Основание:</i></p>	<p>З-ПК-1.3 [1] - Знать теоретические и аналитические модели и основные приемы проведения эксперимента в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом</p>

аппаратуры и информационных технологий для проведения исследования - проведение теоретических и экспериментальных исследований		Профессиональный стандарт 40.039, 40.037	У-ПК-1.3 [1] - Уметь формулировать задачи исследования в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом, выбирать подходящие модели, экспериментальные приемы и методы исследования В-ПК-1.3 [1] - Владеть навыками анализа полученных результатов, формулирования выводов, корректировки дальнейшего плана исследования в области физики конденсированного вещества, фотоники, физики лазеров, полупроводниковой физики, взаимодействия излучения с веществом
--	--	--	--

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	- формирование психологической готовности к профессиональной деятельности по избранной профессии (В15)	Использование воспитательного потенциала дисциплин общепрофессионального модуля для: - формирования устойчивого интереса к профессиональной деятельности, потребности в достижении результата, понимания функциональных обязанностей и задач избранной профессиональной деятельности, чувства профессиональной ответственности через выполнение

		учебных, в том числе практических заданий, требующих строгого соблюдения правил техники безопасности и инструкций по работе с оборудованием в рамках лабораторного практикума.
Профессиональное воспитание	- формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (В19)	<p>1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. <p>2.Использование воспитательного потенциала дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытых и теорий.
Профессиональное воспитание	Формирование культуры информационной безопасности (В23)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирование базовых навыков информационной безопасности через изучение последствий халатного отношения к работе с информационными системами, базами данных (включая персональные данные), приемах и

		методах злоумышленников, потенциальном уроне пользователям.
--	--	---

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>10 Семестр</i>						
1	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями	1-5	0/15/0	Т-2 (10)	15	ДЗ-5	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
2	Статистический анализ данных, вычисляемых по спектрам флуоресценции, диффузного отражения и поглощения	6-10	0/15/0	ДЗ-10 (15)	15	ДЗ-10	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
3	Методы машинного обучения в спектроскопии	11-15	0/15/0	ДЗ-15 (20)	20	ДЗ-15	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2, В-ПК-1.2, 3-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
	<i>Итого за 10 Семестр</i>		0/45/0		50		
	Контрольные мероприятия за 10 Семестр				50	3	3-ПК-3, У-ПК-3, В-ПК-3, 3-ПК-1.2, У-ПК-1.2,

								В-ПК-1.2, З-ПК-1.3, У-ПК-1.3, В-ПК-1.3,
--	--	--	--	--	--	--	--	--

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
Т	Тестирование
ДЗ	Домашнее задание
Э	Экзамен

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>10 Семестр</i>	0	45	0
1-5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями	0	15	0
1 - 5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями Теоритическое описание распространения света в тканях, приближенные модели, численное моделирование, оптические свойства, измеряемые величины, решение обратной задачи	Всего аудиторных часов 0 Онлайн 0	15 0 0	0
6-10	Статистический анализ данных, вычисляемых по спектрам флуоресценции, диффузного отражения и поглощения	0	15	0
6 - 7	Методы описательной статистики, дисперсионный анализ Методы описательной статистики, проверка распределения данных на нормальность, дисперсионный анализ данных, полученных в результате спектрального анализа	Всего аудиторных часов 0 Онлайн 0	5 0 0	0
8	Параметрические методы анализа Критерий Стьюдента, анализ повторных измерений, поправка на множественность сравнений	Всего аудиторных часов 0 Онлайн 0	5 0 0	0
9 - 10	Непараметрические методы анализа Качественные и порядковые переменные, анализ долей, поправка на непрерывность, таблицы сопряженности, точный критерий Фишера, критерий Мак-Нимара, критерий Манна-Уитни, Уилкоксона, Крускалла-Уоллиса, Фридмана	Всего аудиторных часов 0 Онлайн 0	5 0 0	0
11-15	Методы машинного обучения в спектроскопии	0	15	0
11 - 12	Методы понижения размерности, кластерного анализа, восстановления пропусков в данных	Всего аудиторных часов 0	8 0	0

	Методы понижения размерности (фильтрация и проекции, с учителем и без), кластерного анализа (четкие и нечеткие), восстановления пропусков в данных	Онлайн		
		0	0	0
13 - 15	Методы машинного обучения с учителем типы входных данных и откликов, системы подкрепления с управлением по реакции и по стимулам, линейная регрессия, логистическая регрессия, наивный байес, линейный дискриминантный анализ, деревья решений, алгоритм k-ближайшего соседа.	Всего аудиторных часов		
		0	7	0
	Онлайн			
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозначение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

Недели	Темы занятий / Содержание
	<i>10 Семестр</i>
1 - 5	Моделирование взаимодействия света с биологическими тканями Решения диффузационного приближения теории переноса излучения, метод Кубелки-Мунка, метод Монте-Карло, метод удвоения-добавления
6 - 10	Методы математической статистики применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python Методы математической статистики применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python
11 - 15	Методы машинного обучения применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python Методы машинного обучения применимо к данным, полученным в результате спектрального анализа, средствами языка Python

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашнего задания, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем. Также во время занятий используются технические средства.

Для выполнения задач по обработке спектральных данных и статистическому анализу используется язык Python.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-3	З-ПК-3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	У-ПК-3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	В-ПК-3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
ПК-1.2	З-ПК-1.2	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	У-ПК-1.2	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	В-ПК-1.2	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
ПК-1.3	З-ПК-1.3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	У-ПК-1.3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15
	В-ПК-1.3	З, ДЗ-5, ДЗ-10, ДЗ-15

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко иочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89		B	
75-84		C	
70-74	4 – «хорошо»	D	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
65-69			Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
60-64	3 – «удовлетворительно»	E	

Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.
---------	------------------------------	---	---

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ В49 Python Recipes Handbook : A Problem-Solution Approach, Berkeley, CA: Apress, 2016
2. ЭИ Р 28 Python и машинное обучение: крайне необходимое пособие по новейшей предсказательной аналитике, обязательное для более глубокого понимания методологии машинного обучения : , Москва: ДМК Пресс, 2017
3. ЭИ Л 14 Наглядная математическая статистика : учебное пособие, Москва: Лаборатория знаний, 2019
4. 004 С 36 Основы Data Science и Big Data. Python и наука о данных : , Санкт-Петербург: Питер, 2020
5. И S34 Optical spectroscopy in chemistry and life sciences : , W. Schmidt, Weinheim: Wiley-VCH, 2005

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

Специальное программное обеспечение не требуется

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы. Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами

обучения – мультимедийным оборудованием. Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены рабочими местами, в том числе компьютерной техникой, с возможностью выхода в сеть «Интернет».

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашних заданий, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем.

На протяжении семестра студенту необходимо сделать 4 самостоятельных работы: №1 - тест по анализу спектров флуоресценции (максимум 10 баллов), №2 - домашнее задание по декомпозиции спектров флуоресценции и/или диффузного отражения (максимум 10 баллов), №3 - домашнее задание по статистической обработке данных (максимум 20 баллов), №4 – тест по классификации данных (максимум 10 баллов).

По итогам прохождения курса студенты должны пройти экзамен. В каждый билет будет включен один теоретический вопрос и одна задача, которую можно решить без использования вычислительных систем.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

При освоении данной дисциплины основную роль играют аудиторные занятия в виде лекций и семинаров, а также самостоятельная работа студентов, заключающаяся в выполнении домашних заданий, повторения ранее пройденного материала и предоставления результатов самостоятельной работы для оценки преподавателем.

На протяжении семестра студенту необходимо сделать 4 самостоятельных работы: №1 - тест по анализу спектров флуоресценции (максимум 10 баллов), №2 - домашнее задание по декомпозиции спектров флуоресценции и/или диффузного отражения (максимум 10 баллов), №3 - домашнее задание по статистической обработке данных (максимум 20 баллов), №4 – тест по классификации данных (максимум 10 баллов).

По итогам прохождения курса студенты должны пройти экзамен. В каждый билет будет включен один теоретический вопрос и одна задача, которую можно решить без использования вычислительных систем.

Автор(ы):

Савельева Татьяна Александровна, к.ф.-м.н.