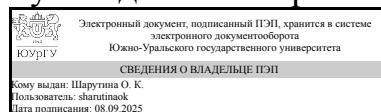


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.13 Информационные технологии и искусственный интеллект
для направления 04.03.01 Химия

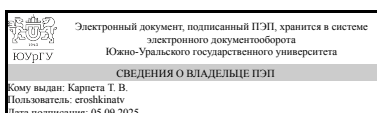
уровень Бакалавриат

форма обучения очная

кафедра-разработчик Прикладная математика и программирование

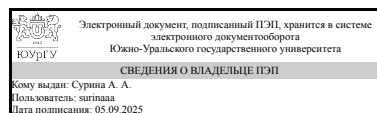
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

Зав.кафедрой разработчика,
к.физ.-мат.н.



Т. В. Карпета

Разработчик программы,
старший преподаватель



А. А. Сурина

1. Цели и задачи дисциплины

формирование у студентов системных знаний, практических навыков и компетенций по применению современных информационных технологий и методов искусственного интеллекта в области химии, химической технологии, нефтехимии и биотехнологии для решения профессиональных и научных задач. Задачи дисциплины: - знакомить с основами информационных технологий и искусственного интеллекта, их применением в химии и смежных дисциплинах; - освоить навыки работы с профессиональным программным обеспечением для моделирования и анализа химических структур и процессов; - изучить принципы сбора, обработки и анализа экспериментальных данных с использованием цифровых технологий; - научиться применять методы машинного обучения и визуального программирования (low-code/no-code платформы) для решения задач классификации, прогнозирования и оптимизации; - развить умения проектирования, реализации и представления комплексных ИТ и ИИ решений в рамках индивидуальных и групповых проектов; - формировать ответственное отношение к срокам выполнения, качеству оформления и соблюдению этических норм при работе с цифровыми технологиями.

Краткое содержание дисциплины

Дисциплина знакомит студентов с современными цифровыми инструментами и методами применения ИТ и ИИ в химии и химической технологии. Студенты изучают построение и анализ химических структур, а также осваивают автоматизацию и визуализацию данных с помощью low-code и no-code платформ. Курс формирует навыки моделирования, обработки экспериментальных данных и реализации проектов с использованием современных цифровых технологий.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-5 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	Знает: базовые методы машинного обучения в задачах анализа данных и особенности их применения, а также способы осуществления сбора и подготовки данных для систем искусственного интеллекта Умеет: классифицировать и идентифицировать задачи искусственного интеллекта; строить прогнозы на основе базовых методов машинного обучения для решения профессиональных задач Имеет практический опыт: использования современных информационных технологий и специализированного программного обеспечения для обработки и представления информации в задачах профессиональной деятельности

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
---	---

1.О.12 Информатика	1.О.15 Физические методы исследования и программные средства на основе искусственного интеллекта, Производственная практика (преддипломная) (8 семестр)
--------------------	--

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
1.О.12 Информатика	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки, основные понятия информатики; формы и способы представления данных в ЭВМ; состав, назначение функциональных компонентов и программного обеспечения ЭВМ; классификацию современных компьютерных систем; специализированные программные средства, соответствующие направлению подготовки; офисные приложения Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных, применять типовые программные средства оформления текстовой и программной документации Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией)

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 ч., 52,25 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		5
Общая трудоёмкость дисциплины	72	72
<i>Аудиторные занятия:</i>	48	48
Лекции (Л)	16	16
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	19,75	19,75
Самостоятельное изучение темы "органический синтез с применением искусственного интеллекта"	10	10
Подготовка к зачету	9,75	9.75

Консультации и промежуточная аттестация	4,25	4,25
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Введение в информационные технологии и искусственный интеллект	4	4	0	0
2	Работа с современными специализированными ПО	18	6	12	0
3	Искусственный интеллект в химии	26	6	20	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Основные понятия ИТ и ИИ. Роль цифровых технологий в химии и химической технологии	4
2	2	Интерфейс и базовые функции.	2
3	2	Моделирование молекул, изомеров, реакций	2
4	2	Основы 3D-визуализации	2
5	3	Основы ML и визуального программирования	2
6	3	Инструменты low-code/no-code для автоматизации и анализа данных	2
7	3	Применение ИИ в химическом моделировании и обработке экспериментов	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	2	Знакомство с ChemSketch, создание базовых молекул, сохранение файлов	2
2	2	Построение изомеров аминокислот и маркировка функциональных групп	2
3	2	3D моделирование и оптимизация химических структур	2
4	2	Моделирование реакций, создание реакционных схем	2
5	2	Визуализация нуклеиновых кислот, создание фрагментов ДНК/РНК	2
6	2	Демонстрация и анализ водородных и пространственных связей	2
7	3	Ознакомление с возможностями low-code/no-code платформ, создание первого приложения для сбора данных	2
8	3	Автоматизация обработки химических данных: импорт, фильтрация, сортировка	2
9	3	Создание интерактивных визуализаций и дашбордов без программирования	2
10	3	Визуальное построение моделей машинного обучения для задач химии	2
11	3	Интеграция данных из Excel и баз данных в приложения	2
12	3	Создание чат-ботов с элементами ИИ для консультаций	2
13-14	3	Разработка рабочих процессов (workflow) для анализа и отчетности	4
15-16	3	Автоматизация документооборота и отчетности на no-code решениях	4

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Самостоятельное изучение темы "органический синтез с применением искусственного интеллекта"	Перкель, А. Л. Стратегия и тактика органического синтеза : учебное пособие / А. Л. Перкель, С. Г. Воронина, Г. Г. Боркина. — Кемерово : КузГТУ имени Т.Ф. Горбачева, 2018. — 95 с. — ISBN 978-5-00137-019-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/115150 (дата обращения: 08.11.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.	5	10
Подготовка к зачету	ЭУМД-1, ЭУМД-2	5	9,75

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-мestr	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	5	Текущий контроль	Работа с современными специализированными ПО	1	30	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения трех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 1. Корректность создания молекул: — все пункты задания выполнены правильно – 2 балла; — некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; — некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов. 2. Полнота и аккуратность сохранения файлов:	зачет

					<p>– все требуемые файлы сохранены правильно и организованы – 3 балла;</p> <p>– некоторые файлы сохранены с незначительными ошибками или пропусками – 1,5 балла;</p> <p>– сохранение выполнено с существенными ошибками или большей частью отсутствует – 0 баллов.</p> <p>3. Аргументация и практические выводы:</p> <p>– все пункты задания выполнены правильно – 2 балла;</p> <p>– некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл;</p> <p>– некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов.</p> <p>4. Качественное оформление работы (структура, ссылки, ясность изложения):</p> <p>– отсутствуют замечания к оформлению отчета – 2 балла;</p> <p>– незначительные замечания к оформлению отчета – 1 балл;</p> <p>– оформление отчета существенно не соответствует правилам – 0 баллов</p> <p>5. Соблюдение сроков выполнения:</p> <p>– лабораторная работа выполнена в срок – 2 балла;</p> <p>– лабораторная работа выполнена в течение недели после окончания срока – 1 балл;</p> <p>– лабораторная работа не выполнена в срок без уважительной причины – 0 баллов.</p> <p>Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы.</p> <p>КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.</p>		
2	5	Текущий контроль	Моделирование химических связей, схем и химических реакций	1	30	<p>Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения трех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов.</p> <p>Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее:</p> <p>1. Корректность выполнения задания:</p> <p>– все пункты задания выполнены правильно – 2 балла;</p>	зачет

					<p>– некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл;</p> <p>– некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов.</p> <p>2. Полнота и аккуратность сохранения файлов:</p> <p>– все требуемые файлы сохранены правильно и организованы – 3 балла;</p> <p>– некоторые файлы сохранены с незначительными ошибками или пропусками – 1,5 балла;</p> <p>– сохранение выполнено с существенными ошибками или большей частью отсутствует – 0 баллов.</p> <p>3. Аргументация и практические выводы:</p> <p>– все пункты задания выполнены правильно – 2 балла;</p> <p>– некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл;</p> <p>– некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов.</p> <p>4. Качественное оформление работы (структура, ссылки, ясность изложения):</p> <p>– отсутствуют замечания к оформлению отчета – 2 балла;</p> <p>– незначительные замечания к оформлению отчета – 1 балл;</p> <p>– оформление отчета существенно не соответствует правилам – 0 баллов</p> <p>5. Соблюдение сроков выполнения:</p> <p>– лабораторная работа выполнена в срок – 2 балла;</p> <p>– лабораторная работа выполнена в течение недели после окончания срока – 1 балл;</p> <p>– лабораторная работа не выполнена в срок без уважительной причины – 0 баллов.</p> <p>Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы.</p> <p>КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.</p>		
3	5	Текущий	Знакомство с low-	1	20	Итоговые баллы за контрольное	зачет

		контроль	code/no-code платформами		<p>мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ.</p> <p>Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов.</p> <p>Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее:</p> <p>1. Корректность выполнения заданий:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все пункты задания выполнены правильно – 2 балла; – некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; – некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов. <p>2. Полнота и аккуратность сохранения файлов:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все требуемые файлы сохранены правильно и организованы – 3 балла; – некоторые файлы сохранены с незначительными ошибками или пропусками – 1,5 балла; – сохранение выполнено с существенными ошибками или большей частью отсутствует – 0 баллов. <p>3. Аргументация и практические выводы:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все пункты задания выполнены правильно – 2 балла; – некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; – некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов. <p>4. Качественное оформление работы (структура, ссылки, ясность изложения):</p> <ul style="list-style-type: none"> – отсутствуют замечания к оформлению отчета – 2 балла; – незначительные замечания к оформлению отчета – 1 балл; – оформление отчета существенно не соответствует правилам – 0 баллов <p>5. Соблюдение сроков выполнения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – лабораторная работа выполнена в срок – 2 балла; – лабораторная работа выполнена в течение недели после окончания срока – 1 балл; – лабораторная работа не выполнена 	
--	--	----------	-----------------------------	--	---	--

						<p>в срок без уважительной причины – 0 баллов.</p> <p>Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы.</p> <p>КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.</p>	
4	5	Текущий контроль	Визуализация и ML на Low-code/No-code платформах	1	40	<p>Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ.</p> <p>Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов.</p> <p>Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее:</p> <p>1. Корректность выполнения заданий:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все пункты задания выполнены правильно – 2 балла; – некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; – некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов. <p>2. Полнота и аккуратность сохранения файлов:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все требуемые файлы сохранены правильно и организованы – 3 балла; – некоторые файлы сохранены с незначительными ошибками или пропусками – 1,5 балла; – сохранение выполнено с существенными ошибками или большей частью отсутствует – 0 баллов. <p>3. Аргументация и практические выводы:</p> <ul style="list-style-type: none"> – все пункты задания выполнены правильно – 2 балла; – некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; – некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов. <p>4. Качественное оформление работы (структура, ссылки, ясность изложения):</p> <ul style="list-style-type: none"> – отсутствуют замечания к оформлению отчета – 2 балла; 	зачет

					<p>– незначительные замечания к оформлению отчета – 1 балл;</p> <p>– оформление отчета существенно не соответствует правилам – 0 баллов</p> <p>5. Соблюдение сроков выполнения:</p> <p>– лабораторная работа выполнена в срок – 2 балла;</p> <p>– лабораторная работа выполнена в течение недели после окончания срока – 1 балл;</p> <p>– лабораторная работа не выполнена в срок без уважительной причины – 0 баллов.</p> <p>Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы.</p> <p>КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.</p>		
5	5	Текущий контроль	Автоматизация анализа и документооборота на No-code решениях	1	20	<p>Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ.</p> <p>Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов.</p> <p>Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее:</p> <p>1. Корректность выполнения заданий:</p> <p>– все пункты задания выполнены правильно – 2 балла;</p> <p>– некоторые пункты задания выполнены с незначительными недостатками – 1 балл;</p> <p>– некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов.</p> <p>2. Полнота и аккуратность сохранения файлов:</p> <p>– все требуемые файлы сохранены правильно и организованы – 3 балла;</p> <p>– некоторые файлы сохранены с незначительными ошибками или пропусками – 1,5 балла;</p> <p>– сохранение выполнено с существенными ошибками или большей частью отсутствует – 0 баллов.</p> <p>3. Аргументация и практические выводы:</p> <p>– все пункты задания выполнены правильно – 2 балла;</p> <p>– некоторые пункты задания</p>	зачет

					<p>выполнены с незначительными недостатками – 1 балл; – некоторые пункты задания не выполнены или выполнены с существенными ошибками – 0 баллов.</p> <p>4. Качественное оформление работы (структура, ссылки, ясность изложения): – отсутствуют замечания к оформлению отчета – 2 балла; – незначительные замечания к оформлению отчета – 1 балл; – оформление отчета существенно не соответствует правилам – 0 баллов</p> <p>5. Соблюдение сроков выполнения: – лабораторная работа выполнена в срок – 2 балла; – лабораторная работа выполнена в течение недели после окончания срока – 1 балл; – лабораторная работа не выполнена в срок без уважительной причины – 0 баллов.</p> <p>Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы.</p> <p>КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.</p>		
6	5	Промежуточная аттестация	Опрос	-	5	<p>Контрольное мероприятие промежуточной аттестации проводится во время зачета. Студенту задаются 5 вопросов из разных тем курса, позволяющих оценить сформированность компетенций.</p> <p>Правильный ответ на вопрос соответствует 1 баллу.</p> <p>Неправильный ответ на вопрос соответствует 0 баллов.</p>	зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
зачет	<p>На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля.</p> <p>Оценка за зачет выставляется по текущему контролю. Студент вправе пройти контрольное мероприятие в рамках промежуточной аттестации для улучшения своего рейтинга.</p>	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ					
		1	2	3	4	5	6
ОПК-5	Знает: базовые методы машинного обучения в задачах анализа данных и особенности их применения, а также способы осуществления сбора и подготовки данных для систем искусственного интеллекта		+	+	+	+	+
ОПК-5	Умеет: классифицировать и идентифицировать задачи искусственного интеллекта; строить прогнозы на основе базовых методов машинного обучения для решения профессиональных задач	+		+			+
ОПК-5	Имеет практический опыт: использования современных информационных технологий и специализированного программного обеспечения для обработки и представления информации в задачах профессиональной деятельности	+	+		+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

Не предусмотрена

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Григорьев А. Машинное обучение. Портфолио реальных проектов. – Москва: Манн, Иванов и Фербер, 2020. – 320 с.

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Григорьев А. Машинное обучение. Портфолио реальных проектов. – Москва: Манн, Иванов и Фербер, 2020. – 320 с.

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	ЭБС издательства Лань	Воронцов, К.В. Искусственный интеллект и машинное обучение. – М.: МФТИ, 2019. – 250 с. https://e.lanbook.com/book/147665
2	Основная литература	ЭБС издательства Лань	Маккинни, У. Python и анализ данных / У. Маккинни ; перевод с английского А. А. Слинкина. – 2-ое изд., испр. и доп. – Москва: ДМК Пресс, 2020. – 540 с. https://e.lanbook.com/book/131721
3	Дополнительная	ЭБС издательства	Панов, М. А. Анализ данных с использованием языка

	литература	Лань	программирования Python: учебное пособие / М. А. Панов. – Екатеринбург: УрГЭУ, 2024. – 329 с. https://e.lanbook.com/book/481577
--	------------	------	--

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Нет

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Практические занятия и семинары	114-7 (2)	Компьютер, пакет программ Microsoft Office
Лекции	202 (3г)	Компьютер, проектор, пакет программ Microsoft Office, Mathcad.