

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук

ЮУрГУ Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе
Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Замышляева А. А.
Пользователь: замышляеваа
Дата подписания: 10.11.2021

А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

**дисциплины 1.0.12 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,
д.физ.-мат.н., проф.

А. А. Замышляева

ЮУрГУ Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе
Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Замышляева А. А.
Пользователь: замышляеваа
Дата подписания: 09.11.2021

Разработчик программы,
старший преподаватель (-)

А. А. Сурина

ЮУрГУ Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе
Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Сурина А. А.
Пользователь: суринана
Дата подписания: 09.11.2021

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления
д.хим.н., проф.

О. К. Шарутина

ЮУрГУ Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе
Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Шарутина О. К.
Пользователь: sharutinaok
Дата подписания: 10.11.2021

Челябинск

1. Цели и задачи дисциплины

получение студентами знаний о компьютерных технологиях, анализе данных в табличных процессорах, системах компьютерной алгебры и применении принципов искусственного интеллекта в химических технологиях

Краткое содержание дисциплины

Основные темы: пакет анализ данных, поиск решения, алгебраические вычисления, аналитические вычисления, табличные функции и интерполяция, производные и интегралы, поиск экстремума

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.11 Информатика	1.О.14 Физические методы исследования и программные средства на основе искусственного интеллекта, Производственная практика, преддипломная практика (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.11 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	
		3	
Общая трудоёмкость дисциплины	72	72	
<i>Аудиторные занятия:</i>			
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	
с применением дистанционных образовательных технологий	0		
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	Расширенные возможности табличного процессора Microsoft Excel	20	6	14	0
2	Приложение для математических и инженерных вычислений Mathcad	20	6	14	0
3	Искусственный интеллект в химии	8	4	4	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Пакет анализа	4
2	1	Подбор параметра, поиск решения и использование макросов	2
3	2	Введение в Mathcad. Интерфейс с пользователем. Алгебраические вычисления	2
4	2	Функции и графики. Математика: вычисления.	2
5	2	Решение уравнений и оптимизация. Аналитические вычисления.	2
6	3	Определение искусственного интеллекта (ИИ). Обзор и классификация методов машинного обучения. Принципы формирования обучающих наборов данных. Использование ИИ в научных исследованиях.	2
7	3	Искусственные нейронные сети и глубокое обучение. Синтез химических соединений с заданными свойствами. Предсказание оптимальных условий проведения сложных химических реакций. Классификация новых соединений.	2

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	Описательная статистика.	2
2	1	Генерация случайных чисел. Построение гистограмм.	2
3	1	Однофакторный дисперсионный анализ.	2
4	1	Линейная регрессия.	2
5	1	Подбор параметра.	2
6	1	Поиск решения.	2
7	1	Использование макросов.	2
8	2	Создание файла решения. Изучение интерфейса.	2
9	2	Вычисления.	2
10	2	Функции и графики.	2
11	2	Табличные функции и интерполяции.	2
12	2	Матрицы и векторы.	2
13	2	Производные и интегралы.	2
14	2	Решение уравнений.	2
15	3	Решение задач при помощи WolframAlpha	2
16	3	Прогнозирование химических реакций на основе ИИ	2

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	Перкель, А. Л. Стратегия и тактика	3	10

"органический синтез с применением искусственного интеллекта"	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.		
Подготовка к зачету	ЭУМД-1, ЭУМД-2	3	9,75

6. Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация

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- местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учи- тыва- ется в ПА
1	3	Текущий контроль	Математическая статистика в Excel	4	20	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения четырех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 5 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 5 баллов за правильное и своевременное выполнение всех задач; 4 балла за выполнение всех задач с недочетами в реализации или несоблюдение срока сдачи работы; 3 балла за частичное выполнение задач; 2 балла за частичное выполнение задач с недочетами в реализации или несоблюдением срока сдачи работы; 1 балл за частичное выполнение задач с существенными недостатками реализации и/или несоблюдением срока сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	зачет
2	3	Текущий контроль	Расширенные возможности Excel	3	15	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения трех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 5 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 5 баллов за правильное и своевременное	зачет

						выполнение всех задач; 4 балла за выполнение всех задач с недочетами в реализации или несоблюдение срока сдачи работы; 3 балла за частичное выполнение задач; 2 балла за частичное выполнение задач с недочетами в реализации или несоблюдением срока сдачи работы; 1 балл за частичное выполнение задач с существенными недостатками реализации и/или несоблюдением срока сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	
3	3	Текущий контроль	Приложение для математических и инженерных вычислений MATHCAD	4	20	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения четырех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 5 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 5 баллов за правильное и своевременное выполнение всех задач; 4 балла за выполнение всех задач с недочетами в реализации или несоблюдение срока сдачи работы; 3 балла за частичное выполнение задач; 2 балла за частичное выполнение задач с недочетами в реализации или несоблюдением срока сдачи работы; 1 балл за частичное выполнение задач с существенными недостатками реализации и/или несоблюдением срока сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	зачет
4	3	Текущий контроль	Математический анализ в MATHCAD	3	15	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения трех практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 5 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 5 баллов за правильное и своевременное выполнение всех задач; 4 балла за выполнение всех задач с недочетами в реализации или несоблюдение срока сдачи работы; 3 балла за частичное выполнение задач; 2 балла за частичное выполнение задач с недочетами в реализации или несоблюдением срока сдачи работы; 1 балл за частичное выполнение задач с существенными недостатками реализации и/или несоблюдением срока сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	зачет

5	3	Текущий контроль	Искусственный интеллект в цифровой химии	2	10	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения двух практических работ. Каждая работа может быть оценена максимум на 5 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 5 баллов за правильное и своевременное выполнение всех задач; 4 балла за выполнение всех задач с недочетами в реализации или несоблюдение срока сдачи работы; 3 балла за частичное выполнение задач; 2 балла за частичное выполнение задач с недочетами в реализации или несоблюдением срока сдачи работы; 1 балл за частичное выполнение задач с существенными недостатками реализации и/или несоблюдением срока сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	зачет
6	3	Промежуточная аттестация	Опрос	1	5	Контрольное мероприятие промежуточной аттестации проводится во время зачета. Студенту задаются 5 вопросов из разных тем курса, позволяющих оценить сформированность компетенций. Правильный ответ на вопрос соответствует 1 баллу. Неправильный ответ на вопрос соответствует 0 баллов.	зачет

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
зачет	На зачете происходит оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Оценка за зачет выставляется по текущему контролю при соблюдении следующих условий: 1) выполнены и сданы в срок все практические работы (срок сдачи – 2 недели с момента выдачи задания); 2) количества баллов, полученных за практические работы, достаточно для выставления зачета. Если студенту не хватает баллов для выставления оценки по текущему контролю, то при условии выполнения всех практических работ студенту предлагается пройти опрос. Студенту задается 5 вопросов из разных тем курса. Студент озвучивает ответы сразу.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Оценочные материалы

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	+++++			

Фонды оценочных средств по каждому контрольному 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:

- Спиридов О.В. Работа в Microsoft Word 2007. Национальный Открытый Университет "ИНТУИТ", 2016, 417с.
<https://e.lanbook.com/book/100438#authors>

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

- Спиридов О.В. Работа в Microsoft Word 2007. Национальный Открытый Университет "ИНТУИТ", 2016, 417с.
<https://e.lanbook.com/book/100438#authors>

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	eLIBRARY.RU	Гольчевский Ю.В. ИНФОРМАТИКА И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. Сыктывкар, 2013, 95 с. https://elibrary.ru/item.asp?id=23095692
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Расчеты и моделирование в химической технологии с применением Mathcad : учебное пособие / Т. В. Лаптева, Н. Н. Зиятдинов, С. А. Лаптев, Д. Д. Первухин. — Казань : КНИТУ, 2018. — 248 с. — ISBN 978-5-7882-2526-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/166241
3	Дополнительная	eLIBRARY.RU	Ловыгина Н.В., Юрина Т.А. ПРОГРАММИРОВАНИЕ НА

	литература		VBA. Омск, 2016, 79 с. https://elibrary.ru/item.asp?id=26171898
4	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	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. https://e.lanbook.com/book/115150

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)
3. PTC-MathCAD(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
Лекции	202 (3г)	Компьютер, проектор, пакет программ Microsoft Office, Mathcad.
Практические занятия и семинары	114-7 (2)	Компьютер, пакет программ Microsoft Office, Mathcad