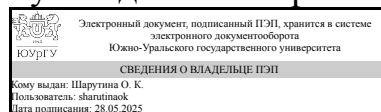


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект
для направления 04.03.01 Химия

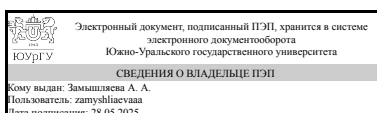
уровень Бакалавриат

форма обучения очная

кафедра-разработчик Прикладная математика и программирование

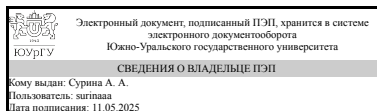
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ.-мат.н., проф.



А. А. Замышляева

Разработчик программы,
старший преподаватель



А. А. Сурина

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-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных
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.25 Офисные приложения и технологии, 1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика, 1.О.12 Цифровые технологии	1.О.23 Введение в квантовую химию, 1.О.14 Физические методы исследования и программные средства на основе искусственного интеллекта, 1.О.24 Строение вещества, 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 Цифровые технологии	Знает: 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 Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией), способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Умеет: применять типовые программные средства оформления текстовой и программной документации, применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией)
1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика	Знает: определения и свойства основных понятий математической статистики, расчетно-теоретические математические методы определения предполагаемого закона распределения генеральной совокупности по выборке, проверки выдвинутой гипотезы, оценки параметров распределения, методы обработки числовых данных с использованием современной вычислительной техники Умеет: производить необходимые вычисления, в том числе с использованием современной вычислительной техники, для обработки результатов экспериментального исследования Имеет практический опыт: вычисления теоретических вероятностей случайных событий, составления законов распределения случайных величин, нахождения числовых характеристик, обработки выборок из массивов числовых данных, связанных с химическими или другими процессами, обработки выборки из массива эмпирических числовых данных и анализа полученных результатов с применением расчетно-теоретических математических методов

1.О.25 Офисные приложения и технологии	Знает: современные офисные приложения и технологии Умеет: оформлять электронные документы с учётом заданных требований Имеет практический опыт: работы в Microsoft Office Word, Microsoft Office Excel, Microsoft Office Power Poin
--	---

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	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 "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-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	5	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	5	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 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	зачет

					сдачи работы; 0 баллов за невыполнение задач.	
3	5	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	5	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	5	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	зачет

					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.	
6	5	Промежуточная аттестация	Опрос	-	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. Студент вправе пройти контрольное мероприятие в рамках промежуточной аттестации для улучшения своего рейтинга.	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-3	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки						+
ОПК-3	Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных	+					+
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. Спиридонов 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:

1. Спиридонов 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
3	Дополнительная литература	eLIBRARY.RU	Ловыгина Н.В., Юрина Т.А. ПРОГРАММИРОВАНИЕ НА VBA. Омск, 2016, 79 с. https://elibrary.ru/item.asp?id=26171898

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Windows(бессрочно)
2. Microsoft-Office(бессрочно)
3. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
4. 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
Практические занятия и семинары	114-7 (2)	Компьютер, пакет программ Microsoft Office, Mathcad
Лекции	202 (3г)	Компьютер, проектор, пакет программ Microsoft Office, Mathcad.