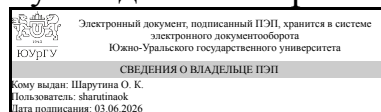


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

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

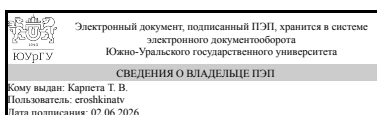
уровень Бакалавриат

форма обучения очная

кафедра-разработчик Прикладная математика и программирование

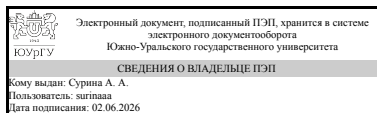
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

Зав.кафедрой разработчика,
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-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

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.24 Строение вещества, 1.О.14 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 Цифровые технологии	Знает: - аппаратное и программное обеспечение цифровых технологий, базовые принципы и основы алгоритмизации, парадигмы, современные и основные языки программирования, систем управления базами данных, low и no-code разработки; - современные информационные ресурсы и информационные технологии, средства поиска, хранения, передачи, систематизации и обработки информации;- отраслевые цифровые технологии и цифровые сервисы, особенности их применения для повышения эффективности, конкурентоспособности и устойчивости работы отраслевых организаций;- основы работы с офисными и/или прикладными отраслевыми программами, их основные модули и функции., - современные цифровые технологии, сквозные цифровые технологии, возможности их применения для решения исследовательских и практических задач профессиональной деятельности; - принципы разработки и особенности использования цифровых технологий в отраслях с учетом требований информационной безопасности; - современные программные средства и информационно-коммуникационные технологии, используемые для решения профессиональных задач с учетом отраслевых особенностей; Умеет: - использовать отраслевые цифровые технологии, сервисы и программы для решения задач профессиональной деятельности с учетом требований информационной безопасности;- использовать современные средства поиска, передачи, хранения, систематизации, обработки и передачи информации.- разрабатывать

	алгоритмические структуры, работать с реляционными базами данных и WEB-конструкторами, low-code (LCDP) и no-code (NCDP) платформами; - использовать офисные программы, включая текстовые и табличные редакторы, средства для создания презентаций, организовывать совместную работу над документами с учетом требований информационной безопасности; использовать современные цифровые технологии и программные продукты для решения исследовательских и практических задач профессиональной деятельности с учетом требований информационной безопасности; Имеет практический опыт: - разработки типовых алгоритмов и применения языков программирования для решения профессиональных задач;- работы с реляционными базами данных, СУБД, WEB-конструкторами, LOW-code и no-code платформами;-использования информационных ресурсов, современных отраслевых цифровых сервисов и технологий для решения задач профессиональной деятельности; - работы с офисными программами, включая текстовые и табличные редакторы, средства для создания презентаций, организации совместной работы над документами., использования современных цифровых технологий и программных средств для решения исследовательских и практических задач профессиональной деятельности.
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
1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика	Знает: 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, определения и свойства основных понятий математической статистики Умеет: производить необходимые вычисления, в том числе с использованием современной вычислительной техники, для обработки результатов экспериментального исследования Имеет практический опыт: обработки выборки из массива эмпирических числовых данных и анализа полученных результатов с применением расчетно-теоретических математических методов, 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
--	---

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 редактором, 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	Семестр	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: – 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. 3. Аргументация и практические выводы: – 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. 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 5. Соблюдение сроков выполнения:	зачет

					– 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. Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы. КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.		
2	5	Текущий контроль	Моделирование химических связей, схем и химических реакций	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 выполнения задания: – 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: – 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. 3. Аргументация и практические выводы: – 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. 4. Качественное оформление работы	зачет

					(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 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. Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы. КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.	
3	5	Текущий контроль	Знакомство с low-code/no-code платформами	1	20 Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ. Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 1. Корректность выполнения заданий: – 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: – 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. 3. Аргументация и практические	зачет

					выводы: – 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. 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 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. Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы. КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.		
4	5	Текущий контроль	Визуализация и ML на Low-code/No-code платформах	1	40	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ. Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее: 1. Корректность выполнения заданий: – 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	зачет

					сохранения файлов: – 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. 3. Аргументация и практические выводы: – 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. 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 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. Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы. КРМ считается невыполненным, если хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.		
5	5	Текущий контроль	Автоматизация анализа и документооборота на No-code решениях	1	20	Итоговые баллы за контрольное мероприятие складываются из выполнения всех практических работ этого КРМ. Каждая работа может быть оценена максимум на 10 баллов. Распределение баллов за выполнение каждой работы следующее:	зачет

					1. Корректность выполнения заданий: — 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: — 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. 3. Аргументация и практические выводы: — 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. 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 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. Максимальная оценка за задание – 10 баллов. Практическая работа не засчитывается (0 баллов), если выявлены признаки плагиата или несамостоятельной работы. КРМ считается невыполненным, если
--	--	--	--	--	--

						хотя бы за 1 практическое задание студент получил 0 баллов.	
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. 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 литература	ЭБС издательства Лань	Панов, М. А. Анализ данных с использованием языка 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)
3. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(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.
--------	-------------	--