Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 22.05.2025 17:54:53

Уникальный программный ключ:

sa953a01204891083f939673078ef1a989dae18a

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»

Факультет физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

04.03.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

ХИМИЯ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2025 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Искусственный интеллект в химии» входит в программу бакалавриата «Химия» по направлению 04.03.01 «Химия» и изучается в 4 семестре 2 курса. Дисциплину реализует Кафедра органической химии. Дисциплина состоит из 3 разделов и 13 тем и направлена на изучение принципов работы искусственного интеллекта и его применения для решения задач в химии, включая, моделирование химических процессов, оптимизацию условий реакций и разработку новых материалов. Курс охватывает аспекты аддитивных технологий, в том числе 3D-печать для создания химических реакторов, устройств для синтеза и анализа, а также разработку новых материалов с уникальными свойствами.

Целью освоения дисциплины является ознакомление студентов с передовыми методами и технологиями, стоящими на пересечении химии, искусственного интеллекта (ИИ) и аддитивного производства. Курс направлен на изучение принципов работы искусственного интеллекта и его применения для решения задач в химии, включая, моделирование химических процессов, оптимизацию условий реакций и разработку новых материалов. Курс охватывает аспекты аддитивных технологий, в том числе 3D-печать для создания химических реакторов, устройств для синтеза и анализа, а также разработку новых материалов с уникальными свойствами.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Искусственный интеллект в химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-12.1 Осуществляет поиск нужных источников информации и данных, воспринимает, анализирует, запоминает и передает информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач;; УК-12.2 Проводит оценку информации, ее достоверность, строит логические умозаключения на основании поступающих информации и данных.;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Искусственный интеллект в химии» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Искусственный интеллект в химии».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Цифровая грамотность; Основы экономики и менеджмента; <i>Продвинутый Excel**</i> ; <i>Основы программирования на Python**</i> ; <i>Инфографика и технология презентаций**</i> ;	Учебная практика; Научно-исследовательская работа; Преддипломная практика; Компьютерные технологии в химии;

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Искусственный интеллект в химии» составляет «2» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			4
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	36		36
Лекции (ЛК)	18		18
Лабораторные работы (ЛР)	18		18
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	27		27
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	9		9
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
Раздел 1	Искусственный интеллект в химических исследованиях	1.1	<p>Введение в искусственный интеллект для химиков</p> <p>Понятие искусственного интеллекта (ИИ), история его развития и основные области применения в науке и технологиях. Обзор использования ИИ в химии для решения научных и практических задач. Базовые принципы и подходы ИИ, отличие между машинным обучением и глубоким обучением</p>	ЛК
		1.2	<p>Основы машинного обучения и нейронных сетей. Ключевые аспекты машинного обучения и нейронных сетей. Типы обучения (с учителем, без учителя, с подкреплением), алгоритмы и модели, а также их применение в химических исследованиях. Основы построения, обучения и валидации моделей ИИ.</p>	ЛК
		1.3	<p>Обзор передовых разработок использования ИИ в органическом синтезе. Инновационное применение машинного обучения для предсказания реакционной способности, оптимизации условий реакций и разработки новых реакционных путей. Практические примеры из современных исследований.</p>	ЛК
		1.4	<p>Инструменты и базы данных для работы с ИИ в химии. Ключевые инструменты, программное обеспечение и базы данных, которые используются для работы с ИИ в химии. Вопросы доступности данных, их предобработки и важности качественного сбора</p>	ЛК

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
			данных для успешного применения ИИ. Примеры популярных платформ и инструментов.	
Раздел 2	Основы аддитивных технологий для химических исследований	2.1	Введение в аддитивные технологии для химиков. Обзор аддитивных технологий, их истории и развития, а также основных принципов и возможностей для химических исследований. Преимущества аддитивных технологий по сравнению с традиционными методами производства, включая их способность к быстрой итерации дизайна, настройке и созданию сложных структур.	ЛК, ЛР
		2.2	Типы аддитивных технологий и 3D печати. Различные методы и технологии аддитивного производства, такие как стереолитография (SLA), селективное лазерное спекание (SLS), метод послойного наплавления (FDM) и другие. Их основные характеристики, преимущества и ограничения для использования в химических исследованиях.	ЛК, ЛР
		2.3	Материалы для аддитивного производства в химии. Обзор материалов, используемых в аддитивных технологиях, включая пластики, металлы, керамику и композиты. Пригодность материалов для использования в химических исследованиях, включая совместимость с химическими веществами, термостойкость и механические свойства.	ЛК, ЛР
		2.4	Применение аддитивных технологий в органическом синтезе.	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
			Конкретных области использования аддитивных технологий в органическом синтезе, включая производство реакторов, систем очистки и других лабораторных устройств. Применения 3D печати, способствующие инновациям в методологии синтеза, оптимизации экспериментов и снижении затрат.	
		2.5	Разработка и интеграция аддитивных технологий в лабораторную практику. Процесс разработки и интеграции аддитивных технологий, дизайн устройств и инструментов для лабораторной практики. Этапы проектирования, выбора материалов, печати и тестирования. Вопросы безопасности и экономической эффективности. Рекомендации по началу работы с аддитивными технологиями в лаборатории, включая выбор оборудования.	ЛК, ЛР
Раздел 3	Искусственный интеллект и аддитивные технологии в современном органическом синтезе и процессах валоризация биомассы	3.1	Основы интеграции ИИ и аддитивных технологий в химии. Обзор возможностей, которые открываются при совместном использовании ИИ и аддитивных технологий в химическом синтезе. Основные принципы и стратегии интеграции этих подходов для разработки новых химических процессов и устройств. Примеры успешных применений, демонстрирующих потенциал комбинированного подхода.	ЛК, ЛР
		3.2	Разработка настраиваемых катализаторов с помощью ИИ и 3D печати. Разработка настраиваемых катализаторов, используя	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
			<p>аналитические возможности ИИ для предсказания каталитической активности и селективности, а также применения аддитивных технологий для их физического создания. Преимущества создания катализаторов, специально адаптированных под конкретные реакции, и возможности для инноваций в синтетической химии. Дизайн процессов валоризация биомассы.</p>	
		3.3	<p>Автоматизация органического синтеза с помощью ИИ и аддитивных технологий. Использование ИИ для автоматизации процессов органического синтеза, включая планирование реакций и управление реакторами, произведенными методами аддитивного производства. Стратегии интеграции данных подходов для создания гибких, высокоэффективных и автономных систем производства химических соединений.</p>	ЛК, ЛР
		3.4	<p>Будущее синтеза: ИИ и аддитивные технологии как движущая сила инноваций и устойчивого развития. Рассмотрение будущих перспектив использования ИИ и аддитивных технологий в органическом синтезе. Потенциальные направления развития этих технологий, включая создание умных материалов, новые подходы в проектировании процессов и устройств, а также влияние на устойчивость и экологичность химического производства. Вызовы и</p>	ЛК, ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
			возможности для исследователей и инженеров в области синтетической химии, конверсии биомассы и устойчивого развития..	

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами (в количестве 12 шт.), доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Гордеев Е.Г., Анаников В.П., "Общедоступные технологии 3D-печати в химии, биохимии и фармацевтике: приложения, материалы, перспективы. Обзор", Успехи химии,

2020, 89, 1507-1561. <http://dx.doi.org/10.1070/RCR4980>

2. Ерохин К.С., Наумов С.А., Анаников В.П., "Анализ, классификация и предотвращение образования дефектов в экструзионной 3D-печати", Успехи химии, 2023, 92, 11, RCR5103. <https://www.uspkhim.ru/RCR5103>

- Meuwly, M. Machine Learning for Chemical Reactions. Chem. Rev. 2021, 121 (16), 10218–10239. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00033>

- Baum, Z. J.; Yu, X.; Ayala, P. Y.; Zhao, Y.; Watkins, S. P.; Zhou, Q. Artificial Intelligence in Chemistry: Current Trends and Future Directions. J. Chem. Inf. Model. 2021, 61 (7), 3197–3212. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00619>

Дополнительная литература:

1. American Chemical Society ACS Publications: <https://pubs.acs.org/>

2. Royal Society of Chemistry RSC Publications: <https://pubs.rsc.org/>

- Wiley on-line library <http://onlinelibrary.wiley.com/>

- Electronic database SciFinder <https://scifinder-n.cas.org/>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации

<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Искусственный интеллект в химии».

- Лабораторный практикум по дисциплине “Использование искусственного интеллекта в химии”

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

РАЗРАБОТЧИК:

Ведущий научный сотрудник
ОИХИ РУДН

Должность, БУП

Анаников Валентин
Павлович

Фамилия И.О.

Подпись

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой

Должность БУП

Воскресенский Леонид
Геннадьевич

Фамилия И.О.

Подпись

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой

Должность, БУП

Хрусталеv Виктор
Николаевич

Фамилия И.О.

Подпись