

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ястребов Олег Александрович

Должность: Ректор

Дата подписания: 17.05.2024 15:41:02

Уникальный программный ключ:

ca953a0120d891083f939673078ef1a989ae18a

**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

Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии

(наименование дисциплины/модуля)

**Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:**

04.04.01 «Химия»

(код и наименование направления подготовки/специальности)

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

«Биоэнергетика и продукты переработки биомассы»

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2024 г.

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии» 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 «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий 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-7	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	УК.7.1. Использует цифровые технологии и методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии;
		УК.7.2. Разрабатывает концепцию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры;
		УК. 7.3. Осуществляет мониторинг использования цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план использования цифровых технологий.

	умозаключения на основании поступающих информации и данных.	
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;
		ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности;
		ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	ПК-2.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов.

### 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии» относится к части, формируемой участниками образовательной компоненте к **вариативной** дисциплине блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий 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-7	Способен: искать нужные источники информации и		Методика работы с базами данных Научно-исследовательская

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	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.		работа Преддипломная практика
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	Биоэнергетика Биопродукция и ее переработка в топливо	Экспериментальная лаборатория 3: Перспективный органический синтез Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ПК-2	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и	Биопродукция и ее переработка в топливо	Экспериментальная лаборатория 3: Перспективный органический синтез Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках		

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

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии» составляет 2 зачетные единицы (72 академ. часа).

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Модули			
		1	2	3	4
Контактная работа, ак.ч.	18			18	
Лекции (ЛК)	9			9	
Лабораторные работы (ЛР)	9			9	
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.	54			54	
Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.					
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72		72	
	зач.ед.	2		2	

#### 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
Раздел 1. Искусственный интеллект в химических исследованиях	Тема 1.1. Введение в искусственный интеллект для химиков  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.	ЛК
	Тема 1.2. Основы машинного обучения и нейронных сетей	ЛК

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	<p>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> <p>Тема 1.3. Применение ИИ в органическом синтезе</p> <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> <p>Тема 1.4. Инструменты и базы данных для работы с ИИ в химии</p> <p>Ключевые инструменты, программное обеспечение и базами данных, которые используются для работы с ИИ в химии. Вопросы доступности данных, их предобработки и важности качественного сбора данных для успешного применения ИИ. Примеры популярных платформ и инструментов.</p>	ЛК
Раздел 2. Основы аддитивных технологий для химических исследований	<p>Тема 2.1. Введение в аддитивные технологии для химиков</p> <p>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.</p>	ЛК
	<p>Тема 2.2. Типы аддитивных технологий и 3D печати</p> <p>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</p>	ЛК

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	использования в химических исследованиях.	
	<p>Тема 2.3. Материалы для аддитивного производства в химии</p> <p>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.</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 2.4. Применение аддитивных технологий в органическом синтезе</p> <p>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.</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 2.5. Разработка и интеграция аддитивных технологий в лабораторную практику</p> <p>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.</p>	ЛК, ЛР
Раздел 3. Искусственный интеллект и аддитивные технологии в современном органическом синтезе и процессах валоризация биомассы	<p>Тема 3.1. Основы интеграции ИИ и аддитивных технологий в химии</p> <p>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.</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 3.2. Разработка настраиваемых катализаторов с помощью ИИ и 3D печати</p> <p>Разработка настраиваемых катализаторов,</p>	ЛК, ЛР

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы*
	используя 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.	
	Тема 3.3. 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.	ЛК, ЛР
	Тема 3.4. 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 возможности для исследователей и инженеров в области синтетической химии, конверсии биомассы и устойчивого развития.	ЛК

\* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – 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	Проектор,

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
	лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	моторизованный экран для проекторов, Wi-Fi
Лаборатория	Учебный класс для лабораторной работы, индивидуальных консультаций, текущего и промежуточного контроля; оборудован набором специализированной мебели и техники.	Набор специализированной мебели; специализированное оборудование химической лаборатории: вытяжной шкаф, испаритель роторный Hei-value digital G3B, испаритель роторный ИКА, цифровые приборы для определения температуры плавления SMP10; весы лабораторные электронные AND EK-610, колбагреватели разных объемов МК-М, сушильный шкаф, мешалка магнитная MRHei-Mix S, мешалка магнитная с подогревом MRHei-Standart, рефрактометр, баня лабораторная комбинированная, вакуумно-химическая станция RS3001 VARIO-pro, циркуляционный охладитель Rotacool Mini, роторно-пластинчатый вакуумный насос RZ2.5, мембранный вакуумный химический насос MZ2CNT, термофен Steinel, УФ-лампа Spectroline, электронный вакуумный регулятор с датчиком CVC3000, клапан Vacuumbrand, аварийная кабина из

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
		<p>нержавеющей стали ШВВ, химическая посуда, холодильник;</p> <p>охладитель Rotacool Mini, роторно-пластинчатый вакуумный насос RZ2.5, мембранный вакуумный химический насос MZ2CNT, термофен Steinel, УФ-лампа Spectroline, электронный вакуумный регулятор с датчиком SVC3000, клапан Vacuumbrand, аварийная кабина из нержавеющей стали SHVV, химическая посуда, холодильник;</p> <p>Wi-Fi</p>
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	<p>Читальный зал ФФМЕН Орджоникидзе д.3. Коворкинг зона Понедельник - пятница 10.00 – 22.00 Читальный зал главного корпуса РУДН Co-working space понедельник - суббота 9.00 - 23.00 Зал №2 понедельник - четверг 10.00 - 17.45 пятница 10.00 - 16.45 Зал №6 понедельник - четверг 10.00 - 17.45 пятница 10.00 - 16.45</p>

## 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>
3. Meuwly, M. Machine Learning for Chemical Reactions. *Chem. Rev.* **2021**, 121 (16), 10218–10239. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00033>
  4. 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/>
3. Wiley on-line library <http://onlinelibrary.wiley.com/>
4. Electronic database SciFinder <https://scifinder-n.cas.org/>

*Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:*

1. ЭБС РУДН им. П. Лумумбы и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:
  - Электронно-библиотечная система РУДН им. П. Лумумбы – ЭБС РУДН им. П. Лумумбы <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](http://www.studentlibrary.ru)
  - ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>
  - ЭБС «Троицкий мост»

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. Блок лекций “Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии”
2. Лабораторный практикум по дисциплине “Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии”

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

## **8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система\* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Использование искусственного интеллекта и аддитивных технологий в химии» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

\* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН им. П. Лумумбы (положения/порядка).

### **РАЗРАБОТЧИКИ:**

**Кафедра органической химии**

Наименование БУП

Подпись

**Анаников В.П.**

Фамилия И.О.

### **РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:**

**Кафедра органической химии**

Наименование БУП

Подпись

**Воскресенский Л.Г.**

Фамилия И.О.

### **РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:**

**Декан ФФМиЕН,  
заведующий кафедрой  
органической химии**

Должность, БУП

Подпись

**Воскресенский Л.Г.**

Фамилия И.О.