

重庆大学化学化工学院 AI 化学与智能创造微专业

《编程基础与数据工具》

课程教学大纲

一、课程名称：编程基础与数据工具

二、学时和学分：32 学时，2 学分

三、授课对象：面向全校理工医类专业本科二年级及以上学生开放，重点支持化学与材料、化工与制药、生物与环境、计算机与自动化等方向学生开展“数据—AI—实验系统”交叉学习；对编程基础不作硬性要求。

四、先修课程：建议已完成《高等数学（或同等数学基础）》及至少一门理工医基础课程（如《大学化学》《大学物理》《生物化学》《工程基础导论》等）之一；不要求具备编程先修，但建议参加“化学与 Python 先修班”或完成同等水平的入门训练。

五、开课单位：化学化工学院

六、授课教师：

序号	教师姓名	工号	职称	所在单位
1	李军	33078	教授	化学化工学院
2	陈书森	33230	副教授	化学化工学院
3	左赵宏	10286	讲师	化学化工学院

七、课程描述：（200-300 字左右）

本课程是数智化学微专业的核心工具课程，旨在帮助化学背景学生建立“用计算机处理和分析化学问题”的基本能力。课程以真实化学数据为载体，系统讲授 Python 语言在化学数据处理、可视化与基础建模中的应用方法，使学生逐步形成将化学问题抽象为可计算问题的思维方式。

在课程定位上，本课程是整个微专业的通用技术支撑层，为后续机器学习、深度学习、智能体系统与自动化实验等课程提供统一的计算语言与操作框架。课程强调“从问题出发”，而非单纯的编程技巧训练，所有案例均源于真实的化学研究或工程场景。

在课程特色上，本课程注重零基础友好与实践导向，通过可视化与交互式实验帮助

学生理解数据与模型的物理含义，避免“黑箱式学习”。同时，课程在设计时即面向后续人工智能课程的需求，使学生在早期阶段即形成系统级计算思维，为综合实践与创新奠定基础。

表 教学环节对应的教学内容

教学环节	教学内容
Python 基础	Python 语法、变量与数据类型、流程控制、函数与模块
NumPy 与 Pandas	科学计算数组、表格数据处理、数据清洗与转换
RDKit 实战	分子结构读取、指纹计算、描述符提取、子结构匹配
数据可视化	化学数据的图形化表达与解释
EDA 与简单建模	探索性数据分析、相关性分析、简单回归与分类案例

八、教学目标

教学环节	知识贡献	能力贡献	素质贡献
Python 基础	理解程序结构与基本语法规则	将领域逻辑转化为程序逻辑	形成工程化表达与规范编程意识
NumPy 与 Pandas	掌握科学计算数据结构与处理范式	处理真实数据、完成清洗与转换	建立数据驱动决策与严谨性意识
RDKit 实战	理解分子与结构数据的计算表示方式	分子数据操作、特征提取与批处理能力	建立跨学科工具使用与迁移学习意识
数据可视化	理解图形表达与信息传递逻辑	结果可视化呈现与解释能力	强化科学表达规范与可沟通性
EDA 与简单建模	认识数据中的模式与规律	初步建模、误差分析与结果评估能力	培养批判性思维与复现意识

九、教学方法：

本课程采用“理论讲授 + 上机实践 + 案例驱动”的混合式教学。理论部分聚焦核心概念与方法框架，强调为何这样做与如何判断结果可靠；实践部分以分阶段任务为主

线，组织学生完成数据处理、可视化与基础建模的操作训练，并通过小项目实现知识整合与迁移应用，形成可复用的分析流程与规范化产出。

十、考核及成绩评定方式：

采用过程性评价与终结性评价相结合的方式，突出“能否解决问题、能否解释结果、能否规范复现”的评价导向：

- 平时作业与上机练习：40%
- 阶段性小项目（数据分析报告/Notebook）：30%
- 期末综合项目或开卷报告（含复现与答辩）：30%

十一、教材/参考书目：

1. 教材

《Python 数据分析基础》，人民邮电出版社

2. 中文参考教材

1. 《Python 科学计算》，机械工业出版社

3. 英文参考教材与资源

1. Wes McKinney, Python for Data Analysis
<https://www.oreilly.com/library/view/python-for-data/9781491957653/>
2. Joel Grus, Data Science from Scratch
<https://www.oreilly.com/library/view/data-science-from/9781492041122/>
3. RDKit Official Documentation
<https://www.rdkit.org/docs/>
4. Bharath Ramsundar et al., Deep Learning for the Life Sciences
<https://www.oreilly.com/library/view/deep-learning-for/9781492039822/>