

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 31.10.2023 16:51:46
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
« 17 » мая 2019 г.

Рабочая программа дисциплины
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Направление подготовки

09.03.03 Прикладная информатика

Направленность программы бакалавриата
Прикладная информатика в химии

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **Информационных технологий и управления**

Кафедра **Систем автоматизированного проектирования и управления**

Санкт-Петербург
2019

Б1.В.14

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, инициалы, фамилия
Доцент		доцент В.Н. Уланов

Рабочая программа дисциплины **«Геометрическое моделирование в химии и химической технологии»** обсуждена на заседании кафедры **Систем автоматизированного проектирования и управления**

протокол от «18» апреля 2019 № 9

Заведующий кафедрой

Т.Б. Чистякова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета **Информационных технологий и управления**

протокол от «15» мая 2019 № 9

Председатель

В.В.Куркина

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Прикладная информатика»		доцент И.В. Новожилова
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник учебно-методического управления		С.Н. Денисенко

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Объем дисциплины.....	6
4. Содержание дисциплины.....	7
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	7
4.2. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	9
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	9
4.3.2. Лабораторные занятия.....	9
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	10
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	11
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	13
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	13
10.1. Информационные технологии.....	13
10.2. Программное обеспечение.....	14
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	14
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	15
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	16
Приложение № 1 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	17

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Данная учебная дисциплина преследует цель получения студентами базовых знаний по математическому и программному обеспечению разработки систем автоматизированного проектирования, в которых осуществляется интерактивное взаимодействие конструктора и синтезированного с помощью компьютера изображения создаваемых трехмерных моделей, освоение и эффективное использование существующих систем графического моделирования.

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-3 Способен проектировать информационные системы по видам обеспечения	ПК-3.1 Применение графических редакторов для создания и обработки изображений	Знать: ядро графической системы, ее приложения, возможности развития; состав ядра графической системы и список возможных приложений, языки расширения графических систем, а также существующие инструментарию адаптации, дополнения и разработки графических систем; стандарты и форматы хранения данных в системах геометрического моделирования, стандарты на разработку графических систем, растровый и векторный способы создания и хранения графической информации; классификацию графических систем и основные функциональные возможности современных графических систем геометрического моделирования; универсальные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов; специализированные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов; как создаются модели различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей) (ЗН-1). Уметь: использовать программу Chem Bio 3D Ultra для визуализации химических соединений, программы Chem Sketch 3D Viewer, 3D Studio Max, Autodesk Maya, и Chem 3D для создания моделей молекул; использовать программы Chem 3D и Hyper Chem для получения моделей молекул в оптимальной конфигурации (У-1). Владеть: использованием программно-аппаратными средствами для решения задач визуализации химических соединений, создания моделей молекул, редактирования и визуализатора молекул при молекулярном моделировании и материаловедении, моделирования поверхностей различных, в том числе многослойных материалов; программами Chem Bio 3D Ultra, Hyper Chem, Chem Sketch 3D Viewer, 3D Studio Max, Chem 3D для создания моделей молекул, программой Avogadro в качестве редактора и визуализатора молекул, для молекулярного моделирования и материаловедения; программой

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
		<p>VRay для моделирования поверхностей различных материалов (металла, пластика, полупрозрачных и прозрачных материалов) и программой Material Editor. для моделирования поверхностей многослойных материалов (Н-1).</p>
	<p>ПК-3.2 Описание технических алгоритмов работы системы, реализующих методы геометрического моделирования</p>	<p>Знать: понятие 3D структур веществ и материалов, современные представления о пространственном строении молекул; естественные координаты и может привести примеры описания пространственного строения с использованием естественных координат; правила переносимости, что такое симметрия молекул, пространственная изомерия молекул, поворотная изомерия и конформации; технологии проектирования: эскиз-объемная модель, плоский чертеж, а также безбумажные технологии проектирования и производства; математическое описание графических элементов на плоскости и пространстве; математические алгоритмы аффинных преобразований на плоскости и в пространстве, а также алгоритмы проективных преобразований и математические модели объектов в пространстве; представление о каркасных моделях, граничных моделях и сплошных моделях химических объектов; основные задачи визуализации, алгоритмы методов отсечения и методов удаления; математическое описание представления поверхностей полигональными сетками, алгоритмы равномерной закраски поверхностей, закраски методом Гуро и Фонга; логические операции над твердыми телами, как реализуется дерево построения сложных твердотельных моделей, а также возможности параметризации и редактирования твердотельных моделей проектируемых объектов (ЗН-2).</p> <p>Уметь: правильно выбирать программные и аппаратные средства геометрического моделирования для автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов; пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических основ компьютерной графики; пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических задач визуализации. (У-2).</p> <p>Владеть: навыками использования программно-аппаратных средств твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов (Н-2).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Настоящая дисциплина принадлежит к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1(Б1.В.13), преподается в 6-м семестре 3-го курса.

Дисциплина базируется на знаниях, полученных студентами в курсах: «Информатика», «Программирование», «Разработка программных систем», «Компьютерная графика», «Математический анализ», «Физика», «Алгебра и геометрия», «Вычислительная математика».

Компетенции, полученные в результате изучения дисциплины «Геометрическое моделирование в химии и химической технологии», используются в дисциплинах: «Проектирование виртуальных моделей промышленных объектов», «Средства визуализации данных», а также в научно-исследовательской работе студента и при выполнении преддипломной практики и подготовке выпускной квалификационной работы бакалавра.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/акад. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	50
занятия лекционного типа	16
занятия семинарского типа, в т.ч.	30
семинары, практические занятия	30
лабораторные работы	–
курсовое проектирование (КР или КП)	–
КСР	4
другие виды контактной работы	–
Самостоятельная работа	58
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	–
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	зачет

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Введение в геометрическое моделирование 3D структур веществ и материалов	2		–		ПК-3	ПК-3.2
2	Геометрические основы компьютерной графики	4	10	–	15	ПК-3	ПК-3.2
3	Геометрические задачи визуализации и твердотельное моделирование	4	10	–	13	ПК-3	ПК-3.2
4	Принципы построения графических систем	2		–	10	ПК-3	ПК-3.1
5	Современные программные комплексы для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов	4	10		20	ПК-3	ПК-3.1

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Введение в геометрическое моделирование 3D структур веществ и материалов. Понятие 3D структур веществ и материалов. Пространственное строение молекул. Современные представления о пространственном строении молекул. Естественные координаты. Примеры описания пространственного строения с использованием естественных координат. Правила переносимости. Симметрия молекул. Пространственная изомерия молекул. Поворотная изомерия, конформации. Место геометрического моделирования в области автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов. Технология проектирования: эскиз-объемная модель, плоский чертеж. Безбумажные технологии проектирования и производства. Востребованность твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов.	2	Слайд-презентация, групповая дискуссия
2	Геометрические основы компьютерной графики. Графические элементы на плоскости и в пространстве. Аффинные преобразования. Проективные преобразования. Математические модели объектов в пространстве. Каркасные модели. Граничные модели. Сплошные модели.	4	Л
3	Геометрические задачи визуализации и твердотельное моделирование Задачи визуализации. Методы отсечения. Методы удаления. Представление поверхностей полигональными сетками. Равномерная закрашка поверхностей. Закрашивание поверхностей. Закрашка методом Гуро и Фонга. Основные задачи геометрической оптики, твердотельное моделирование. Логические операции над твердыми телами. Дерево построения сложных твердотельных моделей. Возможности параметризации и редактирования твердотельных моделей проектируемых объектов. Области применения твердотельных и поверхностных моделей проектируемых объектов.	4	Л
4	Принципы построения графических систем. Ядро графической системы, ее приложения, возможности развития. Состав ядра графической системы и список возможных приложений. Языки расширения графических систем. Существующие инструментари адаптации, дополнения и разработки графических систем. Понятие конвейера ввода/вывода графической информации. Пользовательский интерфейс, использование аппаратных особенностей графических процессоров и графических адаптеров. Стандарты и форматы хранения данных в системах геометрического моделирования. Стандарты на разработку графических систем. Растровый и векторный способы создания и хранения графической информации. Преимущества и недостатки растрового и векторного способов хранения графической информации. Смешанные форматы хранения графической информации. Проблемы конвертирования данных из одной графической системы в другую. Классификация графических систем. Основные функциональные возможности современных графических систем геометрического моделирования	2	Слайд-презентация, групповая дискуссия
5	Современные программные комплексы для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Универсальные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Использование Autodesk 3ds Max для создания моделей молекул. Использование программы VRay для моделирования поверхностей различных материалов (металла, пластика, полупрозрачных и прозрачных материалов). Специализированные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Использование программы Chem Bio3D Ultra для визуализации химических соединений. Использование программы Chem Sketch 3D Viewer для создания моделей молекул. Использование программы Chem 3D для создания моделей молекул. Построение моделей путем импорта структурных формул, созданных в Chem Draw. Построение моделей непосредственно в Chem 3D. Создание моделей различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей). Перевод моделей в структурные формулы путем экспорта в Chem Draw. Использование программы Nurel Chem для создания моделей молекул. Визуализация молекулярных колебаний методом молекулярной динамики. Получение моделей молекул в оптимальной конформации с помощью программ Chem 3D и Nurel Chem. Использование программы Avogadro в качестве редактора и визуализатора молекул, для молекулярного моделирования и материаловедения.	4	Л

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Аффинные преобразования объектов на плоскости. Разработка программного обеспечения для создания интерактивного тренажера по изучению аффинных преобразований объектов на плоскости.	4	Групповая дискуссия
2	Трёхмерные аффинные преобразования объектов. Разработка программного обеспечения для создания интерактивного тренажера по изучению аффинных преобразований объектов в пространстве.	6	Групповая дискуссия
3	Моделирование освещения. Разработка с помощью графических средств OpenGL или DirectX программного приложения для создания интерактивного тренажера по изучению алгоритмов моделирования освещения.	10	Групповая дискуссия
5	Создание 3D моделей объектов в программе Autodesk 3ds Max. Практическое освоение программы Autodesk 3ds Max на примерах создание 3D моделей химических объектов.	4	Групповая дискуссия
5	Визуализация молекулярных структур в программе Chem 3D. Практическое освоение программы Chem 3D на примерах моделирования молекулярных структур химических веществ	6	Групповая дискуссия

4.3.2. Лабораторные занятия.

Учебным планом не предусмотрены.

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Раздел 2. Геометрические основы компьютерной графики Вопрос: Классификационные характеристики математических моделей геометрических объектов	15	Устный опрос
3	Раздел 3 Геометрические задачи визуализации и твердотельное моделирование Вопрос: Современные тенденции в создании реалистических изображений объектов	13	Устный опрос
4	Раздел 4. Принципы построения графических систем Вопрос: Взаимосвязь систем геометрического моделирования с системами подготовки научной документации	10	Устный опрос
5	Раздел 5. Современные программные комплексы для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов Вопрос: Сравнительная характеристика современных программных комплексов для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов	20	Устный опрос,

Обязательными при изучении дисциплины являются следующие виды самостоятельной работы:

- разбор теоретического материала по пособиям и конспектам лекций;
- самостоятельное изучение указанных теоретических вопросов с использованием литературы;
- разработка алгоритмов и программных приложений по заданию практическим работ;
- составление отчетов по практическим занятиям.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте:

<http://media.technolog.edu.ru>.

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Своевременное выполнение обучающимися мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций.

При сдаче зачета, студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

Билет №1

1. Основные положения структурной теории строения молекул.
2. Метод Гуро.
3. Алгоритм вращения отрезка на плоскости.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачтено».

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Норенков, И. П. Автоматизированные информационные системы : учеб. пособие / И. П. Норенков. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. – 342 с.
2. Советов, Б. Я. Представление знаний в информационных системах : учеб. для вузов / Б. Я. Советов, В. В. Цехановский, В. Д. Чертовский. – Москва : Академия, 2011. – 143 с.

б) электронные учебные издания:

3. Гужов, В.И. Цифровая голография. Математические методы : учебное пособие / В.И. Гужов. – Санкт-Петербург : Лань, 2019. – 80 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)
4. Дегтярев, В. М. Инженерная и компьютерная графика : учебник для учреждений высшего профессионального образования по техническим направлениям / В. М. Дегтярев, В. П. Затыльников. - 4-е изд., стер. - Электрон. текстовые дан. – Москва : Академия, 2013. – 240 с. (ЭБ)
5. Катунин, Г.П. Основы мультимедийных технологий : учебное пособие / Г.П. Катунин. – Санкт-Петербург : Лань, 2018. – 784 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)
6. Никулин, Е.А. Компьютерная графика. Оптическая визуализация : учебное пособие / Е.А. Никулин. – Санкт-Петербург : Лань, 2018. – 200 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)
7. Никулин, Е.А. Компьютерная графика. Фракталы : учебное пособие / Е.А. Никулин. – Санкт-Петербург : Лань, 2018. – 100 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)
8. Селянкин, В.В. Компьютерное зрение. Анализ и обработка изображений : учебное пособие / В.В. Селянкин. – Санкт-Петербург : Лань, 2019. – 152 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)
9. Советов, Б.Я. Информационные технологии: теоретические основы: учебное пособие / Б.Я. Советов, В.В. Цехановский. – 2-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2017. – 444 с. (ЭБС «ЛАНЬ»)

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Рабочий учебный план подготовки бакалавров по направленности **«Прикладная информатика в химии»** направления подготовки 09.03.03 **«Прикладная информатика»**, рабочая программа дисциплины и учебно-методические материалы по дисциплине размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медиа по адресу: <http://media.technolog.edu.ru>.

Для подготовки к практическим занятиям и выполнения самостоятельной работы студенты могут использовать следующие Интернет-ресурсы:

- innovation.gov.ru (сайт об инновациях в России);
- inftech.webservis.ru, citforum.ru (сайты информационных технологий);
- www.novtex.ru/IT (веб-страница журнала «Информационные технологии»);
- www.exponenta.ru (образовательный математический сайт);
- model.exponenta.ru (сайт о моделировании и исследовании систем, объектов, технологических процессов и физических явлений);
- prodav.exponenta.ru, sernam.ru (сайты по цифровой обработке сигналов);
- www.gosthelp.ru/text/GOSTR507794096Statistiche,
- www.statsoft.ru/home/textbook/modules/stquacon (веб-страницы, посвященные методам и средствам мониторинга и контроля качества);
- www.blackboard.com, bb.vpgroup.ru, moodle.org,

websoft.ru/db/wb/root_id/webtutor, websoft.ru/db/wb/root_id/courselab (ресурсы, посвященные средам электронного обучения);
edu.ru (федеральный портал «Российское образование»);
www.openet.ru (российский портал открытого образования);
elibrary.ru (информационно-аналитический портал «Научная электронная библиотека»);
webofknowledge.com, scopus.com (международные мультидисциплинарные аналитические реферативные базы данных научных публикаций).
Электронно-библиотечные системы:
«Электронный читальный зал – БиблиоТех» (режим доступа: <http://bibl.litigi.ru/service1.html>, вход по логину и паролю);
«Лань» (режим доступа: <http://e.lanbook.com/books>, свободный вход с любого зарегистрированного компьютера института).

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Геометрическое моделирование в химии и химической технологии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП (СТО):

СТП СПбГТИ 040-02 КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014 КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению;

СТП СПбГТИ 048-2009 КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;
серьезное отношение к изучению материала;
постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
взаимодействие с обучающимися посредством электронной информационно-образовательной среды.

Практические занятия проводятся в компьютерном классе с использованием доступа к сети Internet и соответствующего программного обеспечения для работы.

Самостоятельная работа студентов осуществляется в компьютерном классе, а также в фундаментальной библиотеке. В фундаментальной библиотеке для студентов открыт доступ к электронно-библиотечным системам: <http://www.knigafund.ru> и «БИБЛИОТЕХ» (г. Москва) <http://bibliotech.ru>.

10.2. Программное обеспечение.

В учебном процессе используется лицензионное системное и прикладное программное обеспечение, приведенное в таблице 1.

Таблица 1 – Лицензионное программное обеспечение

Наименование программного продукта	Лицензия
Microsoft Windows 10	Лицензия по договору с СПбГТИ(ТУ) DreamSpark 700552810
Microsoft Visual Studio 2012	
Microsoft Excel 2016	
Microsoft Word 2016	
LibreOffice, Apache OpenOffice.org	Бесплатная лицензия
Chem 3D	Условно бесплатная лицензия
Chem Draw	Условно бесплатная лицензия
Hyper Chem	Условно бесплатная лицензия
Avogadro	Условно бесплатная лицензия
Chem Sketch 3DViewer	Условно бесплатная лицензия
ChemBio3DUltra	Условно бесплатная лицензия
Autodesk 3ds Max	Студенческая лицензия

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс».

Профессиональные базы данных, информационные справочные и поисковые системы:

1. inftech.webservis.ru, citforum.ru (сайты информационных технологий);
 2. www.novtex.ru/IT (сайт журнала «Информационные технологии»);
 3. www.exponenta.ru (образовательный математический сайт);
 4. www.msdn.microsoft.com/ru-ru (материалы по разработке приложений на платформе Microsoft);
 5. edu.ru (федеральный портал «Российское образование»);
 6. www.openet.ru (российский портал открытого образования);
 7. elibrary.ru (информационно-аналитический портал «Научная электронная библиотека»);
 8. webofknowledge.com, scopus.com (международные мультидисциплинарные аналитические реферативные базы данных научных публикаций);
- www.yandex.ru, www.google.ru, xrambler.ru (информационно-поисковые системы).

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Учебные классы кафедры систем автоматизированного проектирования и управления интегрированы в локальную вычислительную сеть. Сеть объединяет 60 автоматизированных рабочих мест (АРМ) студентов в учебных классах, 6 серверов различного назначения, в том числе серверы дистанционной системы обучения и исследования, 2 контроллера домена, сервер ключей лицензионного программного обеспечения. Сеть организована по топологии «звезда» со скоростью передачи данных 100 Мбит/с для клиентских компьютеров и 1000 Мбит/с для серверов. Информационные ресурсы сети используют студенты, аспиранты, преподаватели. Каждый пользователь получает персональную регистрацию и доступ к информационным ресурсам и серверам в соответствии с принятой политикой информационной безопасности. Для хранения персональной информации используются личные каталоги пользователей, доступ к которым может быть осуществлен пользователем с любого компьютера, подключенного к локальной вычислительной сети. Доступ к сети Интернет имеется со всех 60 компьютеров, используемых в качестве АРМ студентов на учебных занятиях. Каждый студент во время самостоятельной подготовки обеспечен автоматизированным рабочим местом. Студенты из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья обеспечиваются печатными и электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

Характеристика материально-технической базы приведена в таблице 2.

Таблица 2 – Характеристика материально-технической базы

Наименование класса	Оборудование
Класс базовых информационных процессов и технологий	Персональные компьютеры (9 шт.): моноблок Lenovo C360 с 19,5-дюймовым дисплеем; процессор Intel Core i3-4130T (2,9ГГц); ОЗУ 4 Гб; НЖМД 1000 Гб; встроенные DVD-RW, видеокарта Intel HD Graphics 4400, звуковая и сетевая карты.
Класс информационных и интеллектуальных систем	Персональные компьютеры (20 шт.): четырехядерный процессор Intel Core i7-920 (2666 МГц), ОЗУ 6 Гб; НЖМД 250 Гб; CD/DVD привод, DVD-RW; видеокарта NVIDIA GeForce GT 220 (1024 Мб); звуковая и сетевая карты, встроенные в материнскую плату.
Лекционная аудитория	Мультимедийный проектор NEC NP41. Ноутбук Asus a6j на базе процессора Intel Core Duo T2000. Мультимедийная интерактивная доска ScreenMedia.
Серверная	Сервер (6 шт.): процессор Intel Core i7 920 2.6GHz, 12Гб ОЗУ, НЖМД 230Гб, НЖМД 1Тб, НЖМД 1Тб; процессор Intel Pentium Dual Core (2,4 ГГц), ОЗУ 4 Гб, НЖМД 230 Гб, НЖМД 1Тб, НЖМД 1Тб; процессор Intel Pentium III (451 МГц), ОЗУ 512 Мб, НЖМД 20 Гб; процессор Intel Xeon E5-2407 2,2ГГц, ОЗУ 16 Гб, НЖМД 250 Гб, НЖМД 250 Гб, НЖМД 300 Гб, НЖМД 300 Гб; процессор Intel(R) Xeon(R) CPU E5345 (2.33GHz); ОЗУ 16Гб, НЖМД 300 Гб, НЖМД 300 Гб, НЖМД 250 Гб, НЖМД 250 Гб; процессор Intel Xeon E5410 @ (2,33 ГГц), ОЗУ 8 Гб, НЖМД 600 Гб

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

Приложение № 1 Фонд оценочных
средств для проведения промежуточной
аттестации

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Геометрическое моделирование в химии и химической технологии»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-3	Способен проектировать информационные системы по видам обеспечения	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)			
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)	
ПК-3.1 Применение графических редакторов для создания и обработки изображений	<p>Знает ядро графической системы, ее приложения, возможности развития.</p> <p>Знает состав ядра графической системы и список возможных приложений, языки расширения графических систем, а также существующие инструментарию адаптации, дополнения и разработки графических систем. Знает стандарты и форматы хранения данных в системах геометрического моделирования, стандарты на разработку графических систем, растровый и векторный способы создания и хранения графической информации. Знает классификацию графических систем и основные функциональные возможности современных графических систем геометрического моделирования.</p> <p>Знает универсальные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Знает специализированные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Знает, как создаются модели различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей) (3Н-1).</p>	Правильные ответы на вопросы №54-73 к зачету	<p>Допускает неточности при определении понятия ядра графической системы. Ошибается при классификации графических систем и их функциональных возможностях. Допускает ошибки при описании форматов хранения данных в системах геометрического моделирования. Знает одну универсальную и специализированную программу 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Требуются подсказки преподавателя.</p>	<p>Практически без ошибок объясняет понятия ядра графической системы, знает состав ядра графической системы и список возможных приложений, языки расширения графических систем, а также существующие инструментарию адаптации, дополнения и разработки графических систем. Без ошибок описывает форматы хранения данных в системах геометрического моделирования, классифицирует графические системы и их функциональные возможности. Знает несколько универсальных и специализированных программ 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов.</p>	<p>Четко объясняет понятия ядра графической системы и дает их классификацию. Идеально знает состав ядра графической системы и список возможных приложений, языки расширения графических систем, а также существующие инструментарию адаптации, дополнения и разработки графических систем. Прекрасно знает более трех универсальных и специализированных программ 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов и осознанно представляет, как создаются модели различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей).</p>	
	<p>Умеет использовать программу Chem Bio 3D Ultra для визуализации химических соединений, программы Chem Sketch 3D Viewer, 3D Studio Max, Autodesk Maya, и Chem 3D для создания моделей молекул. Умеет использовать программы Chem 3D и Hyper Chem для получения моделей молекул в оптимальной конформации (У-1).</p>		Правильные ответы на вопросы №40-49 к зачету	<p>Умеет использовать одну из программ Chem Bio 3D Ultra, Chem Sketch 3D Viewer, Hyper Chem, 3D Studio Max и Chem 3D для создания моделей молекул. Об остальных имеет общее представление.</p>	<p>Умеет использовать две из программ Chem Bio 3D Ultra, Chem Sketch 3D Viewer, Hyper Chem и Chem 3D для создания моделей молекул. Об остальных имеет общее представление.</p>	<p>Способен полностью самостоятельно использовать любую из программ Chem Bio 3D Ultra, Chem Sketch 3D Viewer, Hyper Chem, Chem 3D для создания моделей молекул</p>
	<p>Имеет опыт использования программно-аппаратных средств для решения задач визуализации химических соединений, создания моделей молекул, редактирования и визуализатора молекул при молекулярном моделировании и материаловедении, моделирования поверхностей различных, в том числе многослойных материалов. Владеет программами Chem Bio 3D Ultra, Hyper Chem, Chem Sketch 3D Viewer, 3D Studio Max, Chem 3D для создания моделей молекул, программой Avogadro в качестве редактора и</p>			Правильные ответы на вопросы №40-52 к зачету	<p>Требуются помощь при решении задачи использования программно-аппаратных средств для визуализации химических соединений, создания моделей молекул, редактирования и визуализатора молекул при молекулярном моделировании и материаловедении, моделирования поверхностей различных, в том числе многослойных материалов</p>	<p>Самостоятельно, лишь с незначительными затруднениями, решает задачу использования программно-аппаратных средств для визуализации химических соединений, создания моделей молекул, редактирования и визуализатора молекул при молекулярном моделировании и материаловедении, моделирования поверхностей различных, в том числе многослойных материалов</p>

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	визуализатора молекул, для молекулярного моделирования и материаловедения. Владеет программой VRay для моделирования поверхностей различных материалов (металла, пластика, полупрозрачных и прозрачных материалов) и программой Material Editor. для моделирования поверхностей многослойных материалов (Н-1).				
ПК-3.2 Описание технических алгоритмов работы системы, реализующих методы геометрического моделирования	<p>Знает понятие 3D структур веществ и материалов, современные представления о пространственном строении молекул. Знает, что такое естественные координаты и может привести примеры описания пространственного строения с использованием естественных координат. Знает правила переносимости, что такое симметрия молекул, пространственная изомерия молекул, поворотная изомерия и конформации. Знает технологии проектирования: эскиз-объемная модель, плоский чертеж, а также безбумажные технологии проектирования и производства.</p> <p>Знает математическое описание графических элементов на плоскости и пространстве. Знает математические алгоритмы аффинных преобразований на плоскости и в пространстве, а также алгоритмы проективных преобразований и математические модели объектов в пространстве. Имеет представление о каркасных моделях, граничных моделях и сплошных моделях химических объектов.</p> <p>Знает основные задачи визуализации, алгоритмы методов отсечения и методов удаления. Знает математическое описание представления поверхностей полигональными сетками, алгоритмы равномерной закраски поверхностей, закраски методом Гуро и Фонга. Знает логические операции над твердыми телами, как реализуется дерево построения сложных твердотельных моделей, а также возможности параметризации и редактирования твердотельных моделей проектируемых объектов (ЗН-2)</p>	Правильные ответы на вопросы №1-39 к зачету	При определении понятия 3D структур веществ и материалов допускает неточности. Ошибается при объяснениях работы алгоритмов аффинных преобразований на плоскости и в пространстве. Допускает ошибки при описании основных задач визуализации, неточности в формулировках логических операций над твердыми телами. Требуется подсказки преподавателя	Практически без ошибок объясняет работу алгоритмов аффинных преобразований на плоскости и в пространстве. В основном правильно описывает основные задачи визуализации, практически без ошибок дает формулировки логических операций над твердыми телами. Ориентируется в алгоритмах равномерной закраски поверхностей, закраски методом Гуро и Фонга.	Правильно объясняет работу алгоритмов аффинных преобразований на плоскости и в пространстве, алгоритмов, реализующих методы отсечения и методы удаления. Уверенно описывает основные задачи визуализации. Правильно объясняет работу алгоритмов равномерной закраски поверхностей, закраски методом Гуро и Фонга

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Умеет правильно выбирать программные и аппаратные средства геометрического моделирования для автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов. Умеет пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических основ компьютерной графики. Умеет пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических задач визуализации (У-2).	Правильные ответы на вопросы №40-53, 67-73 к зачету	Допускает ошибки при выборе программных и аппаратных средств геометрического моделирования для автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов. Путается в основах компьютерной графики при разработке программных приложений для изучения геометрических задач визуализации.	Практически без ошибок выбирает программные и аппаратные средства геометрического моделирования для автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов. Правильно использует полученные знания при разработке программных приложений для изучения геометрических основ компьютерной графики.	Уверенно выбирает программные и аппаратные средства геометрического моделирования для автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов. Четко и эффективно использует полученные знания при разработке программных приложений для изучения геометрических основ компьютерной графики.
	Владеет навыками использования программно-аппаратных средств твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов (Н-2)	Правильные ответы на вопросы №40-53, 67-73 к зачету	С трудом и не без поддержки преподавателя решает задачу твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов с использованием программно-аппаратных средств.	Полностью самостоятельно решает задачу твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов с использованием программно-аппаратных средств.	Легко и уверенно справляется с задачей использования программно-аппаратных средств для твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-3 :

1. Основные положения структурной теории строения молекул.
2. Виды структурной изомерии.
3. Естественные координаты.
4. Пространственное строение молекул.
5. Правила переносимости.
6. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии.
7. Пространственная изомерия и её виды.
8. Поворотная изомерия.
9. Конформации молекул. Конформационные превращения
10. Изомерия скелета.
11. Структурная изомерия.
12. Понятие геометрического моделирования в химии.
13. ГМ как часть науки информатики.
14. Области исследований и применений ГМ в химии.
15. 3D модели молекул.
16. Модели прямой на плоскости.
17. Взаимное расположение графических элементов на плоскости.
18. Модели прямой в пространстве.
19. Взаимное расположение графических элементов в пространстве.
20. Основные задачи геометрической оптики.
21. Аффинные преобразования на плоскости.
22. Аффинные преобразования в пространстве.
23. Сложные аффинные преобразования.
24. Проективные преобразования.
25. Методы моделирования поверхностей.
26. Каркасные поверхности.
27. Точечные поверхности. Метод Z-буфера.
28. Кинематические поверхности.
29. Каркасные модели.
30. Сплошные модели.
31. Объёмное отсечение отрезка.
32. Логическое конструирование 3d- объектов.
33. Удаление невидимых линий.
34. Удаление невидимых граней.
35. Алгоритмы закрашивания. Кисть и текстура.
36. Шейдеры.
37. Закрашивание поверхностей.
38. Метод Гуро.
39. Метод Фонга.
40. Создание 3D моделей молекул в программе Autodesk 3ds Max.
41. Создание 3D моделей молекул в программе Autodesk Maya.
42. Создание 3D моделей молекул в программе Avogadro.
43. Создание 3D моделей молекул в программе ChemSketch 3DViewer.
44. Создание 3D моделей молекул в программе ChemBio3DUltra.
45. Создание 3D моделей молекул в программе HyperChem
46. Создание 3D моделей молекул импортом из ChemDraw их структурных формул.
47. Создание 3D моделей молекул в программе Chem 3D
48. Создание 3D моделей молекул в программе HyperChem

49. Визуализация молекулярных структур в программе Chem 3D.
50. Создание 3D моделей материалов.
51. Моделирование поверхностей различных материалов в программе VRay
52. Моделирование поверхностей многослойных материалов в программе Material Editor.
53. Программой Avogadro в качестве редактора и визуализатора молекул.
54. Современные графические системы.
55. Ядро графической системы
56. Языки расширения графических систем
57. Алгоритмические фракталы.
58. Геометрические фракталы.
59. Методы компьютерной анимации.
60. Графические примитивы API Windows.
61. Графическая библиотека OpenGL.
62. Программирование графики DirectX.
63. Растровые форматы графических файлов.
64. Векторные форматы графических файлов.
65. Метафайлы.
66. Классификация графических систем.
67. Создание 3D моделей в программе SolidWorks
68. Создание 3D моделей в программе SketchUP
69. Создание 3D моделей в программе AutoCAD
70. Создание 3D моделей в программе 3DS Max
71. Создание 3D моделей в программе Inventor
72. Создание 3D моделей в программе ZBrush
73. Создание 3D моделей в программе Blender

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета, студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015 КС УКДВ. Порядок организации и проведения зачетов и экзаменов.

Шкала оценивания на зачете двухбалльная («зачет», «незачет»).