

Аннотация к рабочей программе дисциплины
(20624)Компьютерное моделирование химических реакций

Направление подготовки (специальность): 09.03.01 Информатика и вычислительная техника

Направленность: профиль«Технологии искусственного интеллекта в нефтегазовой отрасли»

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения: очная;

Кафедра, обеспечивающая преподавание дисциплины: Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины

ПК-3и-22Г. Способен осуществлять концептуальное моделирование проблемной области и проводить формализацию представления знаний в системах искусственного интеллекта:

-ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта

Результат обучения

Знать:

ПК-3и-22Г.-3 модели химических реакций

Уметь:

ПК-3и-22Г.-3 находить необходимое программное обеспечение для решения поставленной задачи

Владеть:

ПК-3и-22Г.-3 проводят анализ результатов и готовят отчет по итогам прохождения программы курса

Краткая характеристика дисциплины

Введение в компьютерное моделирование химических реакций; Строение молекул и их квантово-химическое представление; Типы химических реакций и квантово-химическое представление; Квантово-химическое моделирование химических реакций; Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций; Квантово-химическое моделирование модельных реакций;

Трудоёмкость (з.е. / часы)

3 з.е. (108час)

Вид промежуточной аттестации

диф.зачет;

Разработчик(и):

_____ д-р хим. наук, профессор Л. М. Халилов

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой ВТИК _____..