

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

УТВЕРЖДАЮ

Директор IT-институт

З.Х. Павлова

(подпись)

29.06.2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА 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);**

Трудоемкость дисциплины: **3 з.е. (108час)**

Уфа 2023

Рабочую программу дисциплины разработал(и):

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

Рецензент

_____ д-р. тех. наук, профессор Ф. У. Еникеев

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);, обеспечивающей преподавание дисциплины 31.08.2022, протокол №1.

Заведующий кафедрой

Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК)_____..

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой ВТИК_____..

Год приема 2023 г.

Рабочая программа зарегистрирована 19.09.2022 № 1 в ОПЛА и внесена в электронную базу данных

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины, предшествующие изучению данной дисциплины (исходя из формирования этапов по компетенциям): Базы данных;Интеллектуальные системы автоматизированного проектирования ;Основы нефтегазового дела;Основы переработки нефти и нефтепродуктов;Основы разработки нефтяных и газовых месторождений;Транспортирование нефти, газа и продуктов их переработки

Дисциплины, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее (исходя из формирования этапов по компетенциям): Веб-технологии;Интеллектуальные системы управления и автоматизации ;Основы нефтегазохимии;Основы нефтепереработки;Преддипломная практика;Разработка мобильных приложений;Технологии бурения и разработки нефтегазовых месторождений;Трубопроводный транспорт углеводородов

Блок: Блок 1. Дисциплины (модули);

Обязательная или часть, формируемая участниками образовательных отношений (в том числе элективные дисциплины): Часть, формируемая участниками образовательных отношений;

Форма обучения: очная

Семестр, в котором преподается дисциплина	Трудоемкость дисциплины				Вид промежу- точной аттестации
	Зачет- ные едини- цы	Часы			
		Общая	В том числе		
			контакт- ная	СРО	
6	3	108	46	62	диф.зачет;
ИТОГО:	3	108	46	62	

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

№ пп.	Формируемые компетенции	Шифр/ индекс компетен- ции
1	Способен осуществлять концептуальное моделирование проблемной области и проводить формализацию представления знаний в системах искусственного интеллекта	ПК-3и-22Г.- 3

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Шифр компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Шифр результата обучения	Результат обучения
ПК-3и-22Г.	ПК-3.1. Разрабатывает концеп-	З(ПК-3и-	Знать:

Шифр компетенции	Индикаторы достижения компетенций	Шифр результата обучения	Результат обучения
	туальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	22Г.)	модели химических реакций
		У(ПК-3и-22Г.)	Уметь: находить необходимое программное обеспечение для решения поставленной задачи
		В(ПК-3и-22Г.)	Владеть: проводят анализ результатов и готовят отчет по итогам прохождения программы курса

3. Структура дисциплины

3.1. Виды учебной работы и трудоемкость (всего и по семестрам, в часах)

Форма обучения: очная

Вид учебной работы	Всего и по семестрам, часы	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Контактная работа, всего в том числе:	46						46						
лекции (всего)	14						14						
-в т.ч. лекции on-line курс	0												
практические занятия (ПЗ)	6						6						
-в т.ч. практические занятия on-line курс	0												
лабораторные работы (ЛР)	24						24						
контролируемая самостоятельная работа (защита курсового проекта, курсовой работы и др. работ (при наличии))	0												
-в т.ч. лабораторные работы on-line курс	0												
иная контактная работа (сдача зачета, экзамена, консультации)	2						2						
проектная деятельность (ПД)	0												
Самостоятельная работа обучающихся (СРО), всего в том числе: (указать конкретный вид СРО)	62						62						
выполнение и подготовка к защите курсового проекта или курсовой работы	0												
выполнение и подготовка к защите РГР работы, реферата, патентных иссле-	0												

дований, аналитических исследований и т.п													
изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	25						25						
подготовка к лабораторным и/или практическим занятиям	30						30						
подготовка к сдаче зачета, экзамена	7						7						
иные виды работ обучающегося (при наличии)	0												
освоение on-line курса	0												
самостоятельная проектная деятельность (СПД)	0												
ИТОГО ПО ДИСЦИПЛИНЕ	108						108						

4. Содержание дисциплины

4.1. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий (в часах)

Форма обучения: очная

(раздела)Номер темы	Название темы (раздела)	Семестр	Трудоемкость, часы					Шифр результата обучения
			Л	ПЗ	ЛР	СРО	Всего	
1	Введение в компьютерное моделирование химических реакций	6	2			5	7	З(ПК-3и-22Г.) У(ПК-3и-22Г.) В(ПК-3и-22Г.)
2	Строение молекул и их квантово-химическое представление	6	2			5	7	З(ПК-3и-22Г.) У(ПК-3и-22Г.) В(ПК-3и-22Г.)
3	Типы химических реакций и квантово-химическое	6	2			5	7	З(ПК-3и-22Г.) У(ПК-3и-22Г.) В(ПК-3и-22Г.)

Номер темы	Назва- ние	Семес- тр	Трудоемкость, часы					Шифр ре-
			Л	ПЗ	ЛР	СРО	Всего	
	пред- ставле- ние							
4	Кван- тово- химиче- ское мо- делиро- вание химиче- ских ре- акций	6	2			5	7	З(ПК- 3и-22Г.) У(ПК- 3и-22Г.) В(ПК- 3и-22Г.)
5	Реализа- ция про- грамм по кван- тово- химиче- скому модели- рованию химиче- ских ре- акций	6	2	6		11	19	З(ПК- 3и-22Г.) У(ПК- 3и-22Г.) В(ПК- 3и-22Г.)
6	Кван- тово- химиче- ское мо- делиро- вание модель- ных ре- акций	6	4		24	31	59	З(ПК- 3и-22Г.) У(ПК- 3и-22Г.) В(ПК- 3и-22Г.)
	ИТОГО:		14	6	24	62	106	

4.2. Содержание лекционного курса

№ пп.	Номер раздела	Название темы	Трудоемкость, часы		
			очная	очно- заочная	заочная
1	1-Введение в компьютерное моде- лирование химиче- ских реакций	Компьютерное моделирование химических ре- акций. Основ- ные понятия Краткая характе- ристика курса.	2		
2	2-Строение молекул и их квантово-хими- ческое представле- ние	Квантово-хими- ческое пред- ставление строе- ния молекул изучение основ строения моле- кул в квантово-	2		

		химическом представлении			
3	3-Типы химических реакций и квантово-химическое представление	Типы химических реакций изучение типов химических реакций	2		
4	4-Квантово-химическое моделирование химических реакций	Квантово-химическое моделирование химических реакций изучение подходов к квантово-химическому моделированию химических реакций	2		
5	5-Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций изучение программной реализации квантово-химического моделирования химических реакций	2		
6	6-Квантово-химическое моделирование модельных реакций	Квантово-химическое моделирование модельных реакций изучение модельных реакций	4		
	-	ИТОГО:	14		

4.3. Перечень лабораторных работ

Номер раздела	№ ЛР	Название лабораторной работы	Трудоемкость, часы		
			очная	очно-заочная	заочная
6-Квантово-химическое моделирование модельных реакций	1	Квантово-химическое моделирование модельных реакций апробация квантово-химического моделирования на модельной реакции	24		
-		ИТОГО:	24		

4.4. Перечень практических занятий

Номер раздела	№ ПЗ	Тема практического занятия	Трудоемкость, часы		
			очная	очно-заочная	заочная
5-Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	1	Программная реализация квантово-химического моделирования химических реакций Апробация программных продуктов для квантово-химического моделирования химических реакций	6		
-		ИТОГО:	6		

4.5. Виды СРО

Номер раздела	Вид СРО	Трудоемкость, часы		
		очная	очно-заочная	заочная
1-Введение в компьютерное моделирование химических реакций	подготовка к сдаче зачета, экзамена	1		
1-Введение в компьютерное моделирование химических реакций	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	4		
2-Строение молекул и их квантово-химическое представление	подготовка к сдаче зачета, экзамена	1		
2-Строение молекул и их квантово-химическое представление	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	4		
3-Типы химических реакций и квантово-химическое представление	подготовка к сдаче зачета, экзамена	1		

3-Типы химических реакций и квантово-химическое представление	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	4		
4-Квантово-химическое моделирование химических реакций	подготовка к сдаче зачета, экзамена	1		
4-Квантово-химическое моделирование химических реакций	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	4		
5-Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	подготовка к сдаче зачета, экзамена	1		
5-Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	подготовка к лабораторным и/или практическим занятиям	6		
5-Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	4		
6-Квантово-химическое моделирование модельных реакций	подготовка к сдаче зачета, экзамена	2		
6-Квантово-химическое моделирование модельных реакций	подготовка к лабораторным и/или практическим занятиям	24		
6-Квантово-химическое моделирование модельных реакций	изучение учебного материала, вынесенного на самостоятельную проработку	5		
-	ИТОГО:	62		

Темы для самостоятельной работы обучающихся

Раздел 1. Введение в компьютерное моделирование химических реакций

подходы к компьютерному моделированию химических реакций

Раздел 2. Строение молекул и их квантово-химическое представление

квантово-химическое представление строения молекул

Раздел 3. Типы химических реакций и квантово-химическое представление

изучение типов химических реакций

Раздел 4. Квантово-химическое моделирование химических реакций

моделирование химических реакций с использованием квантово-химических реакций

Раздел 5. Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций

программная реализация по квантово-химическому моделированию химических реакций

Раздел 6. Квантово-химическое моделирование модельных реакций

моделирование модельных реакций в рамках квантовой химии

5. Формы текущего контроля успеваемости и проведения промежуточной аттестации

Перечень оценочных средств текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине приведен Фонде оценочных средств (приложение Б).

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Учебно-методическое обеспечение

Сведения об обеспеченности дисциплины основной, дополнительной и учебно-методической литературой приведены в формах № 1-УЛ и № 2-УЛ (приложение А).

6.2. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, рекомендуемых для освоения дисциплины

Названия современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, рекомендуемых для освоения дисциплины	Ссылки на официальные сайты
Интернет-Университет Информационных Технологий	http://www.intuit.ru
Научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp
Профессиональный информационно-аналитический ресурс, посвященный машинному обучению, распознаванию образов и интеллектуальному анализу данных.	http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Заглавная_страница
Университетская библиотека онлайн	http://biblioclub.ru/
Электронная библиотека диссертаций РГБ	http://diss.rsl.ru/

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

7.1. Перечень специальных аудиторий, кабинетов, лабораторий и пр., используемых при реализации дисциплины с перечнем основного оборудования

№ пп.	Номер помещения	Оснащенность помещения (перечень основного оборудования)	Наименование помещения
1	1-420в	Компьютер Intel Core 2 Duo E8200(1);Компьютер WIN i3-550(2);Компьютер персональный i3-4170/21,5" PHILIPS 226V4LAB(1);МФУ hp Laser Jet Pro M1536dnf<CE538A>A4(1);Монитор 19" Acer(1);Монитор ASUS VA24DQ Black 23,8", шт(3);Сервисное устройство для очистки Katun 3 м(1);Системный блок CRONA:i7 11700/DDR4 2*16GB/SSD 250Gb Samsung/HDD 1Tb/600W(3);Шкаф(ы) для хранения	Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования
2	1-432	Компьютер Nettop Pegatron Walle L6 PV D-SUB(15);Компьютер тип K2 i3-3220/21,5" LG 22EA63T-P(1);Проектор мультимедийный Sony VPL-CX150(1);Системный блок UNIVERSAL D1(18);Столы, стулья	Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа – укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения.
3	1-432	Компьютер Nettop Pegatron Walle L6 PV D-SUB(15);Компьютер тип K2 i3-3220/21,5" LG 22EA63T-P(1);Проектор мультимедийный Sony VPL-CX150(1);Системный блок UNIVERSAL D1(18);Столы, стулья	Лаборатория – оснащенная лабораторным оборудованием, в зависимости от степени сложности.
4	1-435	Компьютер Pegatron Nettop MiniPC Wall-e L6(12);Монитор Samsung S-LC24F390FHIXCI(9);Монитор Samsung S-LC24FG73FQIXCI(5);Проектор Optoma EH334(1);Системный блок UNIVERSAL D1(14);Столы, стулья	Учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации – укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения.
5	1-435	Компьютер Pegatron Nettop MiniPC Wall-e L6(12);Монитор Samsung S-LC24F390FHIXCI(9);Монитор Samsung S-LC24FG73FQIXCI(5);Проектор Optoma EH334(1);Системный блок UNIVERSAL D1(14);Столы, стулья	Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций
6	1-444	Компьютер Nettop Pegatron Walle L6 PV D-SUB(1);Настенный экран Master Picture 244x244 MW(1);Проектор Acer ProjectorP1203(1);мультимедиа-проектор;Учебно-наглядные пособия по дисциплине,набор демонстрационного оборудования; Столы, стулья;	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа – укомплектована специализированной (учебной) мебелью, набором демонстрационного оборудования и учебно-наглядными пособиями, обеспечивающими тематические иллюстрации, соответствующие рабочим учебным программам дисциплин (модулей).
7	1-447	Сервер HP ProLiant DL320 G6 E5503(1);Графическая станция Fermo Intel P4308IP4LHJC/IntelXeonE5-2630(1);Коммутатор 24 портов 2-го	Лаборатория – оснащенная лабораторным оборудованием, в зависимости от степени сложности.

7.2. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, используемых в учебном процессе при освоении дисциплины

№ пп.	Наименование ПО	Лицензионная чистота (реквизиты лицензии, свидетельства о гос. регистрации и т.п., срок действия)
1	ANSYS Academic	Дата выдачи лицензии 30.12.2016
2	Антивирус Kaspersky	Дата выдачи лицензии 27.10.2010
3	ОС Windows 7	Дата выдачи лицензии 01.01.2006, Поставщик: Свободное программное обеспечение

8. Организация обучения лиц с ограниченными возможностями здоровья

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, обучающихся по данной образовательной программе, разрабатывается индивидуальная программа освоения дисциплины с учетом особенностей их психофизического развития, их индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

Приложение А

Форма № УЛ-1

СВЕДЕНИЯ

об обеспеченности дисциплины основной и дополнительной учебной литературой

Наименование дисциплины: (20624)(20624)Компьютерное моделирование химических реакцийНаправление подготовки (специальность): 09.03.01 Информатика и вычислительная техникаНаправленность: профиль«Технологии искусственного интеллекта в нефтегазовой отрасли»Форма обучения: очная;Кафедра, обеспечивающая преподавание дисциплины: Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);

Тип	Назначение учебных изданий	Семестр			Библиографическое описание	Кол-во экз.	Адрес нахождения электронного	Кoeffициент
		очная	очно-заочная	заочная				
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Основная литература	Для изучения теории;	6			Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — Текст : электронный. — URL: https://e.lanbook.com/book/167744 (дата обращения: 13.12.2021).	1	http://www.e.lanbook.com	1.00

Основная литература	Для выполнения лабораторных работ;	6			Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 522 с. — Текст : электронный. — URL: https://e.lanbook.com/book/172254 (дата обращения: 13.12.2021).	1	http://www.e.lanbook.com	1.00
Основная литература	Для выполнения практических занятий;	6			Нарышкин, Д. Г. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи : учебное пособие / Д. Г. Нарышкин. — Москва : РИОР : ИНФРА-М, 2019. — 199 с. — Текст : электронный. - URL: https://znanium.com/catalog/product/1010046 (дата обращения: 13.12.2021).	1	http://www.znanium.com	1.00
Дополнительная литература	Для выполнения лабораторных работ;	6			Ильичев, Е. В. Квантовая информатика и квантовые биты на основе сверхпроводниковых джозефсоновских структур: Учебник / Е.В. Ильичев, Я.С. Гринберг. - Новосибирск: НГТУ, 2013. - 172 с. - Текст : электронный. - URL: https://znanium.com/catalog/product/490017 (дата обращения: 13.12.2021). — Режим доступа: по подписке.	1	http://www.znanium.com	1.00

Дополнительная литература	Для выполнения практических занятий; Для изучения теории;	6			Ведринский, Р. В. Квантовая механика: учебник / Ведринский Р.В. - Ростов-на-Дону: Издательство ЮФУ, 2009. - 384 с. - Текст : электронный. - URL: https://znanium.com/catalog/product/553266 (дата обращения: 13.12.2021). – Режим доступа: по подписке.	1	http://www.znanium.com	1.00
Примечание – Графы 1-5,8 заполняются кафедрой, графы 7 и 9 - библиотекой								

Составил:

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

Год приема 2023 г.

СВЕДЕНИЯ**об обеспеченности дисциплины учебно-методическими изданиями**Наименование дисциплины: (20624)(20624)Компьютерное моделирование химических реакцийНаправление подготовки (специальность): 09.03.01 Информатика и вычислительная техникаНаправленность профиль«Технологии искусственного интеллекта в нефтегазовой отрасли»Форма обучения очная;Кафедра, обеспечивающая преподавание дисциплины: Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);

Назначение учебных изданий	Семестр			Библиографическое описание	Кол-во экз.		Адрес нахождения электронного	Коэффициент
	очная	очно-заочная	заочная		Всего	в том числе		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Для выполнения практических занятий;	6			Квантово-химическое моделирование химических реакций : учебно-методическое пособие для выполнения практических заданий по дисциплине "Компьютерное моделирование химических реакций" / УГНТУ, каф. ВТИК ; сост. Л. М. Халилов. - Уфа : УГНТУ, 2018. - 2,93 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov1.pdf . - Текст : электронный.	1	0	http://bibl.rusoil.net	1.00

Для выполнения СРО;	6			Компьютерное моделирование химических реакций : учебно-методические указания к выполнению самостоятельных работ для бакалавров по направлению "Информатика и вычислительная техника" / УГНТУ, каф. ВТИК ; сост. Л. М. Халилов. - Уфа : УГНТУ, 2018. - 500 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov.pdf . - Текст : электронный.	1	0	http://bibl.rusoil.net	1.00
Для выполнения лабораторных работ;	6			Компьютерное моделирование химических реакций : учебно-методическое пособие для лабораторных работ студентов / сост.: Л. М. Халилов, Д. Н. Исламов. - Уфа : УГНТУ, 2019. - 960 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov2.pdf . - Текст : электронный.	1	0	http://bibl.rusoil.net	1.00
Примечание – Графы 1-5,8 заполняются кафедрой, графы 6,7 и 9 - библиотекой								

Составил:

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

Год приема 2023 г.

Приложение Б

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

УТВЕРЖДАЮ

Директор IT-институт

_____ 3.Х. Павлова
29.06.2023

**Фонд оценочных средств по текущей успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине
(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);

Трудоемкость дисциплины: 3 з.е. (108час)

Уфа 2023

ФОС по текущей успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине разработал (и):

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

—
Рецензент

_____ д-р. тех. наук, профессор Ф. У. Еникеев

—

ФОС по текущей успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине рассмотрен и одобрен на заседании кафедры Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);, обеспечивающей преподавание дисциплины 31.08.2022, протокол №1.

Заведующий кафедрой Вычислительная техника и инженерная кибернетика (ВТИК);_____..

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой ВТИК _____..

Год приема 2023 г.

ФОС по текущей успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине
зарегистрирован 19.09.2022 № 1 в отделе МСОП и внесен в электронную базу данных

1. Паспорт фонда оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Шифр результата обучения	Результат обучения	Индикатор достижения компетенций	Показатели достижения результатов освоения компетенций	Вид оценочного средства
1	Введение в компьютерное моделирование химических реакций	В(ПК-3и-22Г.)	модели химических реакций	ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	оценивает перспективы и возможности использования компьютерного моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	характеризует теоретические основы компьютерного моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		У(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	проводит формализацию компьютерного моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
4	Строение молекул и их квантово-химическое	В(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель	использует способы и методы компьютерного	Письменный и

	представление		проблемной области системы искусственного интеллекта	моделирования химических реакций для повышения производительности труда в нефтехимических производствах	устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)	ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	перечисляет способы и методы компьютерного моделирования химических реакций для решения производственных задач	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		У(ПК-3и-22Г.)	ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	использует различные способы и методы моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
7	Типы химических реакций и квантово-химическое представление	В(ПК-3и-22Г.)	ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	использует принципы построения молекул	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)	ПК-3.1. Разрабатывает	дает определение понятия	Письменный

				концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	тиям модели и моделирования химических реакций	ный и устный опрос Собеседование Тестирование
		У(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	характеризует теоретические основы компьютерного моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
10	Квантово-химическое моделирование химических реакций	В(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	проектирует модели химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	перечисляет принципы построения молекул	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование

		У(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	анализирует результаты химических реакций и формирует отчет	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
13	Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций	В(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	оценивает перспективы и возможности использования компьютерного моделирования химических реакций для повышения производительности труда в нефтехимических производствах	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	характеризует теоретические основы компьютерного моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		У(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	выбирает средства реализации моделирования химических реакций	Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование

16	Квантово-химическое моделирование модельных реакций	В(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	оценивает перспективы и возможности использования компьютерного моделирования химических реакций для повышения производительности труда в нефтехимических производствах	Лабораторная работа Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		З(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	дает определение проектно-технологическим особенностям компьютерного моделирования химических реакций	Лабораторная работа Письменный и устный опрос Собеседование Тестирование
		У(ПК-3и-22Г.)		ПК-3.1. Разрабатывает концептуальную модель проблемной области системы искусственного интеллекта	описывает порядок работ по компьютерному моделированию химических реакций	Лабораторная работа Письменный и устный опрос Собеседование Тестиро-

						вание
--	--	--	--	--	--	-------

2. Перечень оценочных средств для текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

п/п	Вид оценочного средства	Краткая характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в фонде	Шкала оценки
1	2	3	4	5
1	Лабораторная работа	Средство проверки умений применять полученные знания по заранее определенной методике для решения задач или заданий по лабораторным исследованиям	Темы, задания для выполнения лабораторных работ; вопросы и требования к их защите	оценка «отлично» выставляется обучающемуся, если правильно выполнено более 90% работы, продемонстрирована выполнимость дескрипторов компетенций оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если правильно выполнено более 75% работы, индикаторы формирования компетенции показаны на должном уровне оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если правильно выполнено более 60% работы, индикаторы формирования компетенции показаны на допустимом уровне оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся, если верно выполнено 60% работы и менее, индикаторы формирования компетенции не выполнены «зачтено» выставляется обучающемуся, если показано полное владение компетенцией, связанной с применением компьютерного моделирования химических реакций «незачтено» выставляется обучающемуся, если показано плохое владение компетенцией, связанной с применением компьютерного моделирования химических реакций
2	Письменный и устный опрос	Оценочное средство для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации. Позволяет выявить и восполнить пробелы в знаниях; повторить, закрепить, систематизировать материал; оценить знания, умения, теоретические и практические навыки; определить уровень сформированных у студентов компетенций по дисциплине (модулю)	Совокупность вопросов, заданий, упражнений, тестов для выполнения контрольных работ, домашних заданий, РГР и иных учебных работ. Комплект билетов для текущей и промежуточной аттестации	оценка «отлично» выставляется обучающемуся, если выполнены все задания измерительного материала, при этом дан ответ на все предложенные вопросы, а так же на дополнительные вопросы, заданные в ходе ответа; обучающийся показал выполнение индикаторов достижения результата образования оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если дан ответ на все задания измерительного материала, при этом в ответе допускаются недочёты, не влияющие на понимание темы и исправленные после указания на них преподавателем, таким образом обучающийся демонстрирует сформированность заявленных компетенций по указанным индикаторам оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если дан ответ не менее, чем на 70% вопросов, при условии, что охвачены все темы измерительного материала. При этом в ответе могут присутствовать ошибки, свидетельствующие о непонимании обучающимся темы вопроса, однако при помощи преподавателя ошибки устраняются, таким образом, обу-

				чающийся демонстрирует достаточную достижимость заявленного уровня формируемых компетенций оценка « <i>неудовлетворительно</i> » выставляется обучающемуся, если не продемонстрировано выполнение индикаторов достижимости формирования заявленного уровня компетенций, то есть ответ не соответствует критерию для выставления оценки "удовлетворительно" и выше « <i>зачтено</i> » выставляется обучающемуся, если показано полное знание теоретических основ компьютерного моделирования химических реакций, а следовательно, полное владение компетенцией, связанной с их применением « <i>незачтено</i> » выставляется обучающемуся, если показано плохое знание теоретических основ компьютерного моделирования химических реакций, а значит, не полное владение компетенцией
3	Собеседование	Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.	Вопросы по темам/разделам дисциплины.	оценка « <i>отлично</i> » выставляется обучающемуся, если даны ответы на все предложенные вопросы, а так же на дополнительные вопросы, заданные в ходе ответа, продемонстрирована выполнимость дескрипторов компетенций оценка « <i>хорошо</i> » выставляется обучающемуся, если в ответах на предложенные вопросы допускаются недочёты, не влияющие на понимание темы и исправленные после указания на них преподавателем, индикаторы формирования компетенции показаны на должном уровне оценка « <i>удовлетворительно</i> » выставляется обучающемуся, если дан ответ на 60% вопросов, при условии, что охвачены все темы измерительного материала. При этом в ответе присутствуют ошибки, свидетельствующие о непонимании обучающимся темы вопроса, однако при помощи преподавателя ошибки устраняются, индикаторы формирования компетенции показаны на допустимом уровне оценка « <i>неудовлетворительно</i> » выставляется обучающемуся, если ответы на вопросы в большинстве своём неправильные или отсутствуют, индикаторы формирования компетенции не выполнены « <i>зачтено</i> » выставляется обучающемуся, если дан ответ не менее чем на 60% вопросов, при условии, что охвачены все темы измерительного материала. При этом в ответе могут присутствовать ошибки, свидетельствующие о непонимании обучающимся темы вопроса, однако при помощи преподавателя ошибки устраняются, продемонстрирована выполнимость дескрипторов компетенций « <i>незачтено</i> » выставляется обучающемуся, если ответы на вопросы в большинстве своём неправильные или отсутствуют, индикаторы формирования компетенции не выполнены
4	Тестирование	Система стандартизированных	Фонд тестовых заданий.	оценка « <i>отлично</i> » выставляется обучающемуся, если Даны правильные ответы на 95-100% вопросов

		простых и комплексных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний, умений и владений обучающегося.		оценка «хорошо» выставляется обучающемуся, если Даны правильные ответы на 75-94% вопросов оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся, если Даны правильные ответы на 51-75% вопросов оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся, если Даны правильные ответы на менее чем 51% вопросов или не даны вообще «зачтено» выставляется обучающемуся, если Даны правильные ответы на более чем 51% вопросов «незачтено» выставляется обучающемуся, если Даны ответы менее чем на 51% вопросов или не даны вообще
--	--	---	--	--

Приложение В

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

Письменный и устный опрос.

Перечень вопросов (задач, заданий, тем, комплекта тестовых заданий):

1. Определение молекулы как основной понятия в теории химических систем
2. Основные понятия теории молекулярных орбиталей как линейной комбинации атомных орбиталей
3. Строение молекулы водорода с точки зрения квантовой химии
4. Типы химических реакций и их представление
5. Равновесные химические реакции и неравновесные системы
6. Квантово-химическое представление, моделирование химических реакций и поверхность потенциальной энергии
7. Определения и энергетическое описание каталитических реакций
8. Описание конкретных программ по квантово-химическому моделированию химических реакций

Полный формат работы представлен в учебно-методическом пособии: Квантово-химическое моделирование химических реакций : учебно-методическое пособие для выполнения практических заданий по дисциплине "Компьютерное моделирование химических реакций" / УГНТУ, каф. ВТИК ; сост. Л. М. Халилов. - Уфа : УГНТУ, 2018. - 2,93 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov1.pdf. - Текст : электронный.

Собеседование.

Перечень вопросов (задач, заданий, тем, комплекта тестовых заданий):

Раздел I. Введение в компьютерное моделирование химических реакций

1. Что такое химическая реакция?
2. Приведите основные понятия моделирования химических реакций
3. Расскажите о методах компьютерного моделирования химических реакций

Раздел II. Строение молекул и квантово-химическое представление

1. Расскажите строение атома
2. Как устроена молекула водорода
3. Опишите на качественном уровне электронное строение молекулы водорода с

Раздел III. Типы химических реакций и квантово-химическое представление

1. Приведите типы химических реакций
2. Опишите равновесные и неравновесные реакции
3. Опишите реакцию образования молекулы водорода с точки зрения квантово-химических представлений

Раздел IV. Квантово-химическое моделирование химических реакций

1. Приведите методы квантово-химического моделирования химических реакций
2. Поясните квантово-химическое моделирование простейших реакций
3. Опишите маршруты реакций при использовании катализатора

Раздел V. Реализация программ по квантово-химическому моделированию химических реакций

1. Какие программные продукты по квантово-химическому моделированию вы знаете?
2. Поясните аппаратные решения конкретных программных продуктов по квантово-химическому моделированию
3. Поясните формат входных и выходных данных конкретных программных продуктов по квантово-химическому моделированию

Раздел VI. Квантово-химическое моделирование модельных реакций

1. Моделирование реакции присоединения
2. Моделирование реакции распада
3. Моделирование каталитических реакций

Полный формат работы представлен в учебно-методическом пособии: Компьютерное моделирование химических реакций : учебно-методические указания к выполнению самостоятельных работ для бакалавров по направлению "Информатика и вычислительная техника" / УГНТУ, каф. ВТИК ; сост. Л. М. Халилов. - Уфа : УГНТУ, 2018. - 500 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov.pdf. - Текст : электронный.

Лабораторная работа.

Перечень вопросов (задач, заданий, тем, комплекта тестовых заданий):

1. Выбор модельной реакции, описание маршрутов реакции и выбор метода расчета
2. Подготовка исходных данных для запуска расчетов
3. Запуск квантово-химических расчетов
4. Вывод данных квантово-химических расчетов для разных маршрутов реакции
5. Выбор маршрута с минимальной энергией поверхности потенциальной энергии
6. Описать квантово-химическую модель модельной реакции

Полный формат работы представлен в Учебно-методическом пособии:

Компьютерное моделирование химических реакций : учебно-методическое пособие для лабораторных работ студентов / сост.: Л. М. Халилов, Д. Н. Исламов. - Уфа : УГНТУ, 2019. - 960 Кб. - URL: http://bibl.rusoil.net/base_docs/UGNTU/VTIK/Khalilov2.pdf. - Текст : электронный.

Тестирование.

Перечень вопросов (задач, заданий, тем, комплекта тестовых заданий):

1. Что является химическим объектом?
Атомы
Молекулы
Материалы
2. Что такое молекула?
Наименьшая часть вещества, обладающая химическими свойствами
Относительно устойчивая совокупность атомов, связанных между собой химическими связями
3. Что такое химическая реакция?
Продукт взаимодействия двух или нескольких химических веществ
Взаимодействие химических соединений между собой и/или под действием внутренних и/или внешних факторов

4. Перечислите классы химических соединений с одной двойной связью
 - Фуллерены
 - Графены
 - Алкены
5. Типы химических реакций, где из двух соединений образуется одно
 - Окисление
 - Восстановление
 - Этерификация
6. Какие орбитали участвуют в образовании двойных связей?
 - s - орбитали
 - p – орбитали
 - d – орбитали
7. Метод молекулярных орбиталей – это...
 - Приближенный метод изучения молекулярных орбиталей как линейная комбинация атомных орбиталей
 - Молекулярная орбиталь – линейная комбинация атомных орбиталей
8. Наиболее используемые квантово-химические методы расчетов молекул
 - Полуэмпирические методы
 - Теория функционала плотности DFT
 - Неэмпирические методы
9. В качестве входных параметров для квантово-химических исследований задаются:
 - Типы атомов и расстояния между ними
 - Координаты и типы атомов
 - Изображение молекулы в пространстве
10. Что такое переходное состояние в реакциях присоединения?
 - Переход одной молекулы в другую
 - Равновесное промежуточное состояние участвующих в реакции исходных молекул
11. Что такое барьер химической реакции?
 - Соппротивление молекул в химической реакции
 - Разница энергии исходных молекул и переходного состояния реакции
12. Анализ продуктов бимолекулярных реакций
 - В ходе реакции образуются одна молекула
 - В ходе реакции образуется две молекулы
 - В ходе реакции могут образоваться одна, две и более молекул
13. Что представляют собой каталитические реакции?
 - В каталитической реакции участвует катализатор
 - Реакции, в которых участвует катализатор, остающийся в продуктах реакции практически в неизменном виде
14. Как находят критические точки при расчетах химических реакции
 - Ищут перегибы в кривых маршрутов реакций
 - Проводят расчет Гессииана реакции
15. Как вычисляют маршруты сложных реакций?
 - Проводят вычисления различными квантово-химическими методами
 - Разбивают маршрут реакции на несколько элементарных реакций

ОТКРЫТЫЕ ВОПРОСЫ:

1. Что такое молекула?
2. Что такое – химическая реакция
3. Что такое катализатор?

4. Что такое энергетический барьер реакции?
5. Что такое маршрут химической реакции?
6. Что такое многостадийные химические реакции?
7. Какие квантово-химические программы используются при изучении реакций?
8. Сформулируйте алгоритм моделирования химических реакций.
9. Назовите типы химических реакций.
10. Как осуществляется поиск критических точек реакции?
11. Как решаются задачи моделирования многостадийных реакций?
12. Что такое равновесные и неравновесные реакции?
13. Опишите образование молекулы водорода из атомов с точки зрения молекулярных орбиталей
14. Что такое реакция этерификации и как ее моделировать?
15. Что такое реакция окисления и как ее моделировать?
16. Что такое реакция восстановления и как ее моделировать?
17. Как устроена молекула алмаза?
18. Как устроена молекула графена?
19. Как устроена молекула фуллерена
20. Где и как можно использовать производные молекул, образованных из атома углерода?

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 _____..