

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 12.09.2021 19:10:28
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

« » _____ 2016 г.

Рабочая программа дисциплины
ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Направление подготовки
09.03.01 – Информатика и вычислительная техника

Направленность программы бакалавриата

Автоматизированные системы обработки информации и управления

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения
Заочная

Факультет **информационных технологий и управления**
Кафедра **систем автоматизированного проектирования и управления**

Санкт-Петербург
2016

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, инициалы, фамилия
Разработчик		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 «13» апреля 2016 № 7

Заведующий кафедрой

Т.Б. Чистякова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления
протокол от «15» апреля 2016 № 7

Председатель

В.В. Куркина

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Информатика и вычислительная техника»		Т.Б. Чистякова
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н.Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины (модуля) 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	7
4.3. Занятия семинарского типа	9
4.3.1. Семинары, практические занятия	9
4.3.2. Лабораторные занятия	9
4.4. Самостоятельная работа	10
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	10
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии	12
10.2. Программное обеспечение	12
10.3. Информационные справочные системы	13
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	13
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	13
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.	14

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.

Код компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОК-7	способностью к самоорганизации и самообразованию	Знать: - основы самоорганизации и самообразования Уметь: - ориентироваться в источниках информации, пользоваться специальными источниками информации, Интернет – ресурсами; Владеть: - навыками использования различных информационных ресурсов при решении поставленных задач;
ОПК-2	способность осваивать методики использования программных средств для решения практических задач	Знать: - методы и алгоритмы геометрического моделирования. Уметь: - составлять новые и адаптировать существующие программные алгоритмы, реализующие методы геометрического моделирования для разработки прикладных программ. Владеть: - современными графическими пакетами, в том числе используемыми в химии и химической технологии.
ОПК-5	способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности	Знать: - основные законы естественнонаучных дисциплин и современные информационно-коммуникационные технологии в профессиональной деятельности. Уметь: - анализировать профессиональную информацию, выделять в ней главное и структурировать, оформлять результаты исследований ; Владеть: - знаниями, позволяющими свободно использовать современные информационно-коммуникационные технологии в профессиональной деятельности; - навыками представления результатов своей деятельности.
ПК-2	способность разрабатывать компоненты аппаратно-программных комплексов и баз данных, используя современные инструментальные средства и технологии программирования	Знать: - методы и алгоритмы геометрического моделирования. - методы проведения тестирования компонентов программного обеспечения ИС; - методы анализа результатов тестирования компонентов программного обеспечения ИС. Уметь: - составлять новые и адаптировать существующие программные алгоритмы, реализующие методы геометрического моделирования для разработки прикладных программ. - работать с современным программным обеспечением, позволяющим проводить тестирование компонентов программного обеспечения ИС. Владеть: - современными программными графическими средствами(OpenGL, DirectX (Direct3D, Direct2D)); - навыками собирать, обобщать, обрабатывать и интерпретировать информацию, анализировать массив полученных исследовательских данных и делать соответствующие выводы.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Настоящая дисциплина принадлежит к обязательным дисциплинам вариативной части Блока 1(Б1.В.20), преподается в 1-м семестре 5-го курса.

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

Компетенции, полученные в результате изучения дисциплины «Геометрическое моделирование в химии и химической технологии», используются в ряде дисциплин, таких как: «Жизненные циклы проектирования трехмерных моделей объектов химии и химической технологии», «Разработка компьютерных тренажеров для обучения проектированию и управлению производственными системами», а также в научно-исследовательской работе студента и при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов		
	Заочная форма обучения 5 курс		
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц / академических часов)	3 / 108		
	1 сессия	2 сессия	Итого
Контактная работа с преподавателем:	6	8	14
занятия лекционного типа	6		6
занятия семинарского типа, в т.ч.		8	8
семинары, практические занятия			
лабораторные работы		8	8
курсовое проектирование (КР или КП)			
КСР			
контроль		4	4
Самостоятельная работа	30	60	90
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)		проверка отчетов о лабораторных работах и КР1, КР2	проверка отчетов о лабораторных работах и КР1, КР2
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	-	Зачет	Зачет

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академические часы		Занятия семинарского типа академ. часы				Самостоятельная работа, академические часы		Формируемые компетенции
		1 сессия	2 сессия	Семинары и/или практические за- нятия		Лабораторные работы		1 сессия	2 сессия	
				1 сессия	2 сессия	1 сессия	2 сессия			
1.	Введение в геометрическое моделирование 3D структур веществ и материалов	1						10		ОК-7 ОПК-5
2	Геометрические основы компьютерной графики	2					2	10	10	ОК-7 ОПК-5 ОПК-2 ПК-2
3	Геометрические задачи визуализации и твердотельное моделирование	1					2	10	10	ОК-7 ОПК-5 ПК-2
4	Принципы построения графических систем	1							10	ОК-7 ОПК-5
5	Современные программные комплексы для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов	1					4		30	ОК-7 ОПК-5 ОПК-2 ПК-2
	Итого	6					8	30	60	

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела-дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1.	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.	1	Слайд-презентация, групповая дискуссия
2	Геометрические основы компьютерной графики. Графические элементы на плоскости и пространстве. Аффинные преобразования. Проективные преобразования. Математические модели объектов в пространстве. Каркасные модели. Граничные модели. Сплошные модели.	2	
3	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.	1	
4	Ядро графической системы, ее приложения, возможности развития. Состав ядра графической системы и список возможных приложений. Языки расширения графических систем. Существующие инструментарии 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	1	Слайд-презентация
5	Универсальные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Использование Autodesk 3ds Max для создания моделей молекул. Использование программы V-Ray 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. 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 Hyper Chem для создания моделей молекул. Визуализация молекулярных колебаний методом молекулярной динамики. Получение моделей молекул в оптимальной конформации с помощью программ Chem 3D и Hyper Chem. Использование программы Avogadro в качестве редактора и визуализатора молекул, для молекулярного моделирования и материаловедения.	1	Кейс-задания. Групповая дискуссия. Тренинги.

4.3. Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

Не предусмотрены

4.3.2. Лабораторные занятия

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

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

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 лабораторных работ;
- составление отчетов по лабораторным занятиям.
- выполнения контрольных работ.

№ Раздела дис-	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Введение в геометрическое моделирование 3D структур веществ и материалов Вопрос: Классификационные характеристики математических моделей геометрических объектов	10	Защита контрольной работы №1
2	Геометрические основы компьютерной графики Вопрос: Каркасные модели.	20	Защита лаб. работ
3	Геометрические задачи визуализации и твердотельное моделирование Вопрос: Современные тенденции в создании реалистических изображений объектов	20	Защита лаб. работ
4	Принципы построения графических систем Вопрос: Взаимосвязь систем геометрического моделирования с системами подготовки научной документации	10	Устный опрос Защита контрольной работы №2
5	Современные программные комплексы для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов Вопрос: Сравнительная характеристика современных программных комплексов для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов	30	Защита лаб. работ и контрольной работы №3
ИТОГО		90	

4.4.1 Темы контрольных работ

В плане предусмотрено выполнение студентами 2 контрольных работ. Контрольные работы соответствуют базовым темам курса «Геометрическое моделирование в химии и химической технологии».

Выполнение 1-ой контрольной работы включает ответы на тестовые вопросы, развернутые ответы, содержащие аналитический обзор и анализ разделов, выносимых на самостоятельную работу по разделам 1 и 2.

Задания 2-ой контрольной работы включают разработку алгоритма и программную реализацию предлагаемого метода геометрического моделирования и выполнение предложенных практических заданий по 2D или 3D графике с использованием одного из графических редакторов. В качестве альтернативы проприетарным (Adobe Photoshop, CorelDraw, Adobe Flash, Adobe Illustrator, Xara

Xtreme, Corel PHOTO-PAINT, Adobe FreeHand MX, Adobe Fireworks, 3DS Max) можно использовать свободные аналоги (GIMP, Paint.NET, OpenOffice.org Draw , Karbon14, Inkscape, Blender 3D)

Количество вариантов заданий по всем контрольным работам соответствует количеству студентов в группе.

Пример выполнения контрольных работ.

Контрольная работа №1

1 Развернутый ответ на вопрос.

Дигитайзеры История создания, устройство, принцип работы. Примеры современных моделей.

Графический планшет (от англ. graphics tablet или graphics pad, drawing tablet, digitizing tablet, digitizer - дигитайзер, диджитайзер) — это устройство для ввода рисунков от руки непосредственно в компьютер. Состоит из пера и плоского планшета, чувствительного к нажатию или близости пера. Также может прилагаться специальная мышь. Это устройство изначально предназначалось для оцифровки изображений. При нажатии на кнопку курсора его местоположение на поверхности планшета фиксируется, а координаты передаются в компьютер.

Первые планшеты работали замысловато: перо, касаясь поверхности, испускало искры, звук, которые улавливались микрофонами, расположенными вблизи. Триангуляционным методом определялось положение пера в пространстве. Такая система была сложной, дорогой и при этом ненадёжной, поскольку внешние шумы мешали точно определить положение пера.

Графические планшеты, подобные современным, были представлены в 1964 году под названием «графакон» (от англ. Graphic Converter). Они содержали сетку тонких проволок, создающих последовательность слабых магнитных импульсов, которые улавливались пером, что позволяло определять текущее положение пера. Первые планшеты для потребительского рынка назывались «КоалаПэд».

В современных планшетах основной рабочей частью также является сеть из печатных проводников, подобная той, что была в «Графаконах». Эта сетка имеет достаточно большой шаг (3—6 мм), но механизм регистрации положения пера позволяет получить шаг считывания информации намного меньше шага сетки (до 200 линий на мм). Шаг считывания информации называется разрешением дигитайзера.

По принципу работы технологии изготовления дигитайзеры делятся на два типа: **электростатические**, регистрирующие локальное изменение электрического потенциала сетки под курсором и **электромагнитные** (более распространенные в настоящее время), в которых перо излучает электромагнитные волны, а сетка служит приемником. Такое перо, называемое активным, требует питания. Вначале для этой цели использовался провод, что было достаточно неудобно при работе.

Фирма Wacom (англ.) решила проблему с питанием пера, создав технологию на основе электромагнитного резонанса, когда сетка взяла на себя роль активного элемента, являясь не только приемником, но и излучателем. Перо

же, фактически лишь отражая волны, преобразует их в ответный сигнал, содержащий информацию о координатах пера в данный момент. Кроме этого возможна передача данных о силе нажатия пера, фиксации/положении органов управления на указателе, используется ли рабочий кончик пера или его "ластик" и даже об угле наклона самого пера (в случае, если такие функции в нём предусмотрены). Определённым недостатком электромагнитных планшетов является чувствительность к излучающим устройствам.

Важной характеристикой современных дигитайзеров является способность регистрировать силу нажатия пера. Как правило, в основе механизма регистрации лежит использование конденсатора переменной ёмкости. В частности, такой тип датчика используется в перьях к планшетам фирмы Wacom. Также регистрация может осуществляться с помощью компонента с переменным сопротивлением или переменной индуктивностью. Существуют реализации, в основе которых лежит пьезоэлектрический эффект. При нажатии пера в пределах рабочей поверхности планшета, под которой проложена сетка проводников, на пластине пьезоэлектрика возникает разность потенциалов, что позволяет определять координаты нужной точки. Такие планшеты вообще не требуют специального пера и позволяют чертить на рабочей поверхности планшета как на обычной чертёжной доске.

Дополнительно в современных графических планшетах также могут определяться наклон пера, направление его поворота в плоскости планшета и даже сила сжатия его рукой.

Также в комплекте графических планшетов совместно с пером может поставляться мышь, которая, однако, работает не как обычная компьютерная мышь, а по тому же принципу, что и перо. Такая мышь может работать только на планшете. Поскольку разрешение планшета гораздо выше, чем разрешение обычной компьютерной мыши, то совместное использование мыши и планшета позволяет достичь значительно более высокой точности при вводе.

Перейдём к основным характеристикам дигитайзеров.

Размер планшета – это размеры активного участка для рисования по горизонтали и вертикали в дюймах(сантиметрах). Изменяется обычно в пределах от 4" x 3" до 12" x 7.7"

Скорость оцифровки или скорость обработки данных, измеряемая в пикселях в секунду(pps). Обычно этот показатель равен 200 pps, что вполне достаточно для получения гладких и ровных линий вне зависимости от быстроты движения вашей руки.

Количество уровней нажима определяет пределы чувствительности головки пера. Обычно этот показатель равен 512-2048, что позволяет моделировать нажатие на кисть или перо при работе с соответствующими графическими программами.

Разрешением планшета называется шаг считывания информации. Разрешение измеряется числом линий на дюйм (англ. lines per inch, lpi). Типичные значения разрешения для современных планшетов составляет несколько тысяч lpi.

Количество степеней свободы описывает число квазинепрерывных характеристик взаимного положения планшета и пера. Минимальное число степеней свободы — 2 (X и Y положения проекции чувствительного центра пера), дополнительные степени свободы могут включать давление, наклон пера относительно плоскости планшета, вращение (положение пера относительно своей вертикальной оси).

Точность дигитайзера — это погрешность в определении координат курсора. Эта величина зависит от типа дигитайзера и от конструкции его компонент. На нее влияет отклонение от идеальной формы регистрирующей сетки планшета, способность воспроизводить координаты неподвижного курсора (повторяемость), устойчивость к разным температурным условиям (стабильность), качество курсора, помехозащищенность и прочие факторы. Точность существующих планшетов колеблется в пределах 0.005" - 0.02"(0,13-0,5 мм). На результат работы также влияет точность действий оператора. В среднем хороший оператор вносит погрешность не более 0.004".

Удобство пера - характеристика сугубо субъективная. Либо легкие перья фирмы Wacom, либо утяжелённые батареей, но, подчас, хорошо сбалансированные перья других фирм. Для подключения планшета к PC обычно используется USB порт, по которому подаётся и питание.

Графические планшеты применяются как для создания изображений на компьютере способом, максимально приближённым к тому, как создаются изображения на бумаге, Кроме того, их удобно использовать для переноса уже готовых изображений в компьютер.

В заключение, насколько слов о выборе современного дигитайзера.

Представленные в настоящее время(2010 год) дигитайзеры можно условно (по возможностям и цене) разделить на 3 группы. К первой (любительской) относятся относительно дешевые планшеты Тайваньской фирмы Genius(хорошо известной по выпуску прекрасных мышей) и менее известной фирмы из Голландии Trust International B.V. Во второй (бюджетной) к ним присоединяется законодатель мод в мире дигитайзеров Английская фирма Wacom. Она же вместе с Genius остается и в третьей (профессиональной).

Дадим характеристику отдельным представителям этих групп.

1-ая группа.

Плоский графический планшет **Trust Slimline Design Tablet TB-5300** с рабочим пространством 140×100 мм (5.5"×4") предназначен для рукописных записей, заметок, рисования, редактирования изображений и видео. В комплект входит эргономичная беспроводная перо-ручка с 3 кнопками и чувствительностью к нажатию 512 уровней. Разрешение планшета 3048 lpi, а точность пера ±0.5 мм. Полная поддержка расширенных планшетных функций операционных систем Windows 7 и Vista. К ним относятся: изменение чувствительности к нажатию, преобразование рукописного текста в цифровой и создание заметок. На планшете имеются 28 дополнительных программируемых виртуальных кнопок быстрого доступа. Интерфейс – USB.

Поставляется с прозрачным листом для копирования рисунков и имеет углубление для хранения пера. Работает в Windows XP и выше.

Ультратонкий планшет **Genius G-Pen F350** для рисования, написания и подписи рукописных электронных писем имеет рабочую область 5"×3" и снабжен беспроводной ручкой-манипулятором с 2-мя программируемыми кнопками, которые могут быть использованы как кнопки мыши. Ручка-манипулятор обладает чувствительностью к давлению 1024 уровня, что позволяет с высокой точностью контролировать форму и толщину линий при рисовании. Разрешение планшета 2000 lpi. Широкая поверхность G-Pen F350 идеально подходит к широкоформатным LCD мониторам. На планшете имеются 22 программируемых горячих клавиш для Office, Internet и Windows Vista. Время работы аккумулятора (батарея AAA) ручки - до 1 года. Интерфейс – USB. Работает в Windows XP и выше.

2-ая группа

Ультратонкий планшет **Genius G-Pen F610** для рисования, написания и подписи рукописных электронных писем имеет рабочую область 10"×6.25" и снабжен беспроводной ручкой-манипулятором с 2-мя программируемыми кнопками, которые могут быть использованы как кнопки мыши. Ручка-манипулятор обладает чувствительностью к давлению 1024 уровня, что позволяет с высокой точностью контролировать форму и толщину линий при рисовании. Разрешение планшета 2000 lpi. Широкая поверхность G-Pen F610 идеально подходит к широкоформатным LCD мониторам. На планшете имеются 29 программируемых горячих клавиш для Office, Internet и Windows Vista. Время работы аккумулятора (батарея AAA) ручки - до 1 года. Интерфейс – USB. Работает в Windows XP и выше.

Графический планшет **Trust Wide Screen Design Tablet TB-7300** с большим, широким экраном размером 12"×7.7" с высоким качеством изображения предназначен для рукописных записей, заметок, рисования, редактирования изображений и видео. Легкость прокрутки, масштабирования и регулировки громкости с помощью двух регуляторов в верхних углах. В комплект входит эргономичная беспроводная перо-ручка с 2 кнопками управления и чувствительностью к нажатию 1024 уровня. 2 регулятора для редактирования изображений и других графических приложений. Разрешение планшета 3048 lpi, а точность пера ±0.5 мм. Чувствительность к углу наклона пера 60°.

Полная поддержка таких расширенных планшетных функций операционных систем Windows 7 и Vista, как изменение чувствительности к нажатию, преобразование рукописного текста в цифровой и создание заметок. Подходит как для широких экранов, так и для стандартных дисплеев. На планшете имеются 32 дополнительных программируемых виртуальных кнопок быстрого доступа. В комплект поставки входит программное обеспечение для рисования, редактирования изображений и добавления написанного от руки текста и рисунков в MS Word, MS Excel или Wordpad. Работает в Windows XP и выше. Интерфейс – USB.

3-ья группа

Планшет **Genius G-Pen M712** для профессиональных компьютерных художников и графических дизайнеров. Устройство отличается большой ра-

бочей областью 12"×7.25" (wide) / 9.5"×7.25" (standard), высоким разрешением 4000 Ipi и широким спектром мультимедийных функций.

Планшет Genius G-Pen M712 совместим с платформами Mac и PC и оборудован специальными панелями для быстрой прокрутки, изменения масштаба изображения и управления уровнем громкости как правой, так и левой рукой. Также, в комплект поставки входит беспроводное перо, которое имеет 1024 уровня чувствительности к нажатию и подставку для хранения. Разрешение планшета 4000 Ipi. Отличительной особенностью устройства является возможность быстрого переключения экрана из стандартного режима отображения в широкоформатный и обратно, благодаря чему размеры активной площади могут изменяться с 241.3×184.2 мм до 304.8×184.2 мм. А 34 «горячих» клавиши обеспечивают пользователю быстрый доступ к наиболее часто используемым приложениям, таким как Office, функциям в ОС Vista и Mac и навигацию в сети интернет.

Функциональные клавиши «Zoom», «Scroll», «Volume», «Wide», «Standart»

Две панели для быстрой прокрутки, изменения масштаба изображения и управления уровнем громкости. Возможность быстрого переключения экрана из стандартного режима отображения в широкоформатный и обратно. Максимальное расстояние от беспроводного пера до рабочей области планшета 10 мм. Время работы аккумулятора (батарея AAA) ручки - до 1 года. Интерфейс – USB. Работает в Windows XP и выше.

Графический планшет **Wacom Intuos4**, способен полностью изменить профессиональную жизнь множества талантливых творческих людей во всем мире. Форма и поверхность планшета были полностью изменены, чтобы обеспечить эргономику и согласованность движений даже в течение длительного времени. Тонкий и эргономичный планшет с размером активной области 223,5×139,7 мм, имеет наклон для ладони и опору для всей руки, что снижает усталость при многочасовой работе. Выполненный в эргономичном дизайне ультратонкий планшет Intuos4 – идеальный инструмент для творческой работы с цифровым контентом. Кнопки на двустороннем (зеркально-симметричном) планшете, программируемые под горячие клавиши и модификаторы, идеально расположены для любого пользователя (как для левши, так и для правши). Клавиши ExpressKeys удобно размещены с одной стороны планшета для быстрого доступа к ним нерабочей рукой. Настраиваемые под каждое отдельное приложение клавиши ExpressKeys служат для оптимизации рабочего процесса и повышения производительности, располагая часто используемые при работе команды прямо под кончиками пальцев, что помогает сэкономить ценное время и свести к минимуму обращение к клавиатуре. Используемые в Intuos4 органические светодиоды в моделях M, L и XL – удобный инструмент, напоминающий пользователю текущее значение, присвоенное каждой клавише ExpressKey.

Еще одно нововведение в Intuos4 – индивидуально настраиваемое пользователем кольцо Touch Ring, позволяющее контролировать до 4 функций в каждом приложении (прокрутка, изменение размеров изображения и кисти, поворот холста и выбор слоя).

Уникальный запатентованный сенсорный наконечник пера Intuos4 Grip Pen позволяет пользователю начать работу практически с нулевой силой нажима (1 грамм). Теперь можно писать, рисовать и выполнять дизайнерскую работу совсем легкими нажатиями по поверхности планшета, что имитирует работу с обычной ручкой.

Перо нового планшета Intuos4 распознает 2048 уровней чувствительности к нажиму, что способствует достижению лучшего результата в программных приложениях, поддерживающих чувствительность к давлению. Перо Intuos4 Grip Pen оснащено чувствительным к давлению ластиком и двумя программируемыми кнопками для назначения таких команд как, например, двойной клик или клик правой кнопкой мыши.

Новый режим точности пера Grip Pen позволяет тонко и детально работать на уровне раstra, обеспечивая точность ± 0.25 мм. Чувствительность к углу наклона пера 60° . Максимальная рабочая высота пера над поверхностью 10 мм. Разрешение планшета 5080 dpi. Максимальная скорость отклика: 200 точек в секунду.

Новое круговое меню обеспечивает хорошо структурированный и быстрый доступ к запрограммированным комбинациям одним движением пера.

Работает в Windows XP и выше. Интерфейс – USB (длина кабеля 2 м.).

2 Ответы на тестовые вопросы

Какие параметры являются основой модели HSB?

высота, длина, объем

контрастность, интенсивность, яркость

тон, насыщенность, яркость

Чему равно минимальное время задержки в формате GIF

1/1000 сек

1/100 сек

1/10

1 сек

Какой метод сжатия предусмотрен для формата GIF

LZW

RLE

JPEG

Deflate

Кто разработал алгоритм LZW

Терри Уэлч

Авраам Лемпель

Яков Зив

Фил Кац

Продолжить фразу

Конформация молекулы это — пространственное расположение атомов в молекуле определённой конфигурации, обусловленное поворотом вокруг одной или нескольких одинарных **сигма-связей**.

Контрольная работа №2

1 Развернутый ответ на вопрос.

Алгоритм Брезенхема для генерации окружности

Для вывода алгоритма рассмотрим первую четверть окружности с центром в начале координат. Проведём генерацию окружности по часовой стрелке с началом в точке $x=0, y=R$, находящейся, как и центр, точно в точке растра. Ясно, что в этом случае y будет монотонно убывающей функцией аргумента x (рис. 1).

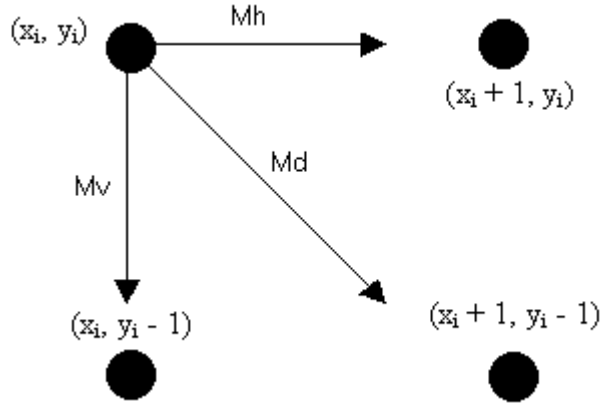
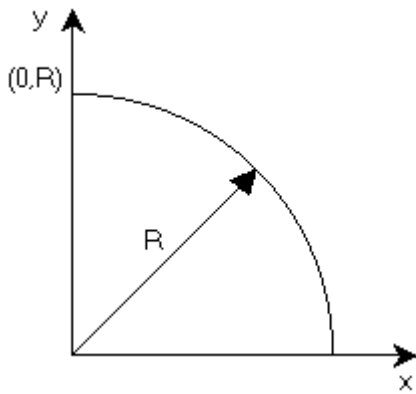


Рисунок 1 Генерация окружности Рисунок 2 Направления движения точки
Поэтому для любой заданной точки на окружности при генерации по часовой стрелке существует только три возможности выбрать следующий пиксель, наилучшим образом приближающий окружность. На рис. 2 эти направления обозначены соответственно Mh(горизонтально вправо), Md(по диагонали вниз и вправо), Mv(вертикально вниз). Алгоритм выбирает тот пиксель, для которого минимален квадрат расстояния между ним и окружностью, т. е.

$$Mh = |(x_i + 1)^2 + (y_i)^2 - R^2|$$

$$Md = |(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2|$$

$$Mv = |(x_i)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2|$$

Вычисления можно упростить, если заметить, что в окрестности точки (x_i, y_i) возможны только пять типов пересечений окружности и сетки растра, приведенных на рис. 3.

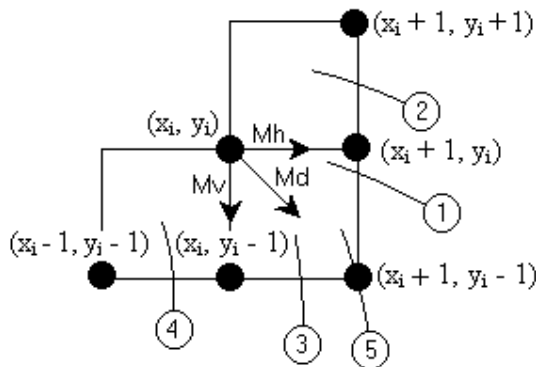


Рисунок 3 Типы пересечений окружности и сетки растра

Для определения конкретного варианта определим местоположение диагонального пикселя. Для этого определим разность между квадратом расстояния от центра окружности до диагонального пикселя $(x_i + 1, y_i - 1)$ и R^2 : $\Delta_i = (x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2$

При $\Delta_i < 0$ диагональная точка $(x_i + 1, y_i - 1)$ находится внутри реальной окружности, т. е. это случаи 1 или 2 на рис. 3. Ясно, что в этой ситуации следует выбрать либо пиксель $(x_i + 1, y_i)$, либо пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$.

Рассмотрим случай 1 и проверим разность квадратов расстояний от окружности до пикселей в горизонтальном и диагональном направлениях:

$$\delta = |(x_i + 1)^2 + (y_i)^2 - R^2| - |(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2|$$

при $\delta \leq 0$ выбираем $(x_i + 1, y_i)$

при $\delta > 0$ выбираем $(x_i + 1, y_i - 1)$

Следует отметить, что при $\delta = 0$ выбор равнозначен. Однако, по алгоритму выбирается горизонтальный шаг.

Количество вычислений, необходимых для оценки величины δ , можно сократить, если заметить, что в случае 1

$(x_i + 1)^2 + (y_i)^2 - R^2 \geq 0$, а $(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 < 0$ так как диагональный пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$ всегда лежит внутри окружности, а горизонтальный $(x_i + 1, y_i)$ - вне ее.

Таким образом, освобождаясь от модулей, δ можно вычислить по формуле

$$\delta = (x_i + 1)^2 + (y_i)^2 - R^2 + (x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2$$

Упростим выражение, дополнив $(y_i)^2$ до $(y_i - 1)^2$ с помощью добавления и вычитания $(-2y_i + 1)$. Получим $\delta = 2[(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2] + 2y_i - 1$.

При этом в квадратных скобках образовалась формула Δ_i и окончательно получаем выражение $\delta = 2(\Delta_i + y_i) - 1$.

Второй случай на рис. 3 более простой. Здесь, однозначно, должен быть выбран горизонтальный пиксель $(x_i + 1, y_i)$. Это следует из анализа рис.3, учитывая, что y является монотонно убывающей функцией. Для тех, кто предпочитает математическое доказательство, покажем, во-первых, что $(x_i + 1)^2 + (y_i)^2 - R^2 < 0$, а $(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 < 0$, поскольку оба пикселя лежат внутри окружности. Получаем $\delta = 1 - 2y_i$, что при любом y_i дает, $\delta < 0$, и, следовательно, выбирается пиксель $(x_i + 1, y_i)$.

При $\Delta_i > 0$ диагональная точка $(x_i + 1, y_i - 1)$ находится вне окружности, что соответствует случаям 3 и 4 на рис. 3. В данной ситуации ясно, что должен быть выбран либо пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$, либо $(x_i, y_i - 1)$.

Рассмотрим сначала случай 3. Аналогично случаю 1 определим ближайший к окружности пиксель. Для этого найдём знак δ' .

$$\delta' = |(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2| - |(x_i)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2|$$

при $\delta' \leq 0$ выбираем $(x_i + 1, y_i - 1)$

при $\delta' > 0$ выбираем $(x_i, y_i - 1)$

Здесь в случае $\delta' = 0$, т. е. когда расстояния равны, выбран диагональный шаг.

Упростим формулу расчёта δ' . Очевидно, что $(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 \geq 0$, а $(x_i)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 < 0$ так как диагональный пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$ находится вне окружности, тогда как вертикальный пиксель $(x_i, y_i - 1)$ лежит внутри ее.

$$\text{Получаем } \delta' = (x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 + (x_i)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2$$

Преобразуем $(x_i)^2$ в $(x_i + 1)^2$ с помощью добавления и вычитания $(2x_i + 1)$ и получим $\delta' = 2[(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2] - 2x_i - 1$. Используя определения Δ_i , получаем $\delta' = 2(\Delta_i - x_i) - 1$

Четвёртый случай аналогичен второму. Выбираем, естественно, вертикальный пиксель $(x_i, y_i - 1)$. Сомневающимся приведем доказательство. Ясно, что $(x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 > 0$ и $(x_i)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 > 0$, поскольку оба пикселя находятся вне окружности. Получаем $\delta' = 2x_i + 1$ что при любом x_i дает, $\delta' > 0$, и, следовательно, выбирается пиксель $(x_i, y_i - 1)$.

В уникальном случае 5 на рис. 3, когда диагональный пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$ лежит на окружности, проблемы выбора нет. Таким образом, при $\Delta_i = 0$ переходим в диагональный пиксель $(x_i + 1, y_i - 1)$.

Подведем итог полученных результатов:

$$\Delta_i < 0$$

$$\delta \leq 0 \text{ выбираем пиксел } (x_i + 1, y_i) \implies Mh$$

$$\delta > 0 \text{ выбираем пиксел } (x_i + 1, y_i - 1) \implies Md$$

$$\Delta_i > 0$$

$$\delta' \leq 0 \text{ выбираем пиксель } (x_i + 1, y_i - 1) \implies Md$$

$$\delta' > 0 \text{ выбираем пиксель } (x_i, y_i - 1) \implies Mv$$

$$\Delta_i = 0 \text{ выбираем пиксель } (x_i + 1, y_i - 1) \implies Md$$

Определим рекуррентные соотношения для реализации пошагового алгоритма. Сначала рассмотрим горизонтальный шаг Mh к пикселю $(x_i + 1, y_i)$. Обозначим это новое положение пикселя как $(i + 1)$. Тогда координаты нового пикселя и значение Δ_i равны

$$x_{i+1} = x_i + 1, y_{i+1} = y_i$$

$$\Delta_{i+1} = (x_{i+1} + 1)^2 + (y_{i+1} - 1)^2 - R^2 = (x_{i+1})^2 + 2x_{i+1} + 1 + (y_i - 1)^2 - R^2 = (x_i + 1)^2 + (y_i - 1)^2 - R^2 + 2x_{i+1} + 1 = \Delta_i + 2x_{i+1} + 1$$

Аналогично координаты нового пикселя и значение Δ_i для шага Md к пикселю $(x_i + 1, y_i - 1)$ таковы:

$$x_{i+1} = x_i + 1, y_{i+1} = y_i - 1, \Delta_{i+1} = \Delta_i + 2x_{i+1} - 2y_{i+1} + 2$$

И, наконец, для шага Mv к $(x_i, y_i - 1)$

$$x_{i+1} = x_i, y_{i+1} = y_i - 1, \Delta_{i+1} = \Delta_i - 2y_{i+1} + 1$$

Блок-схема алгоритма приведена на рис.4

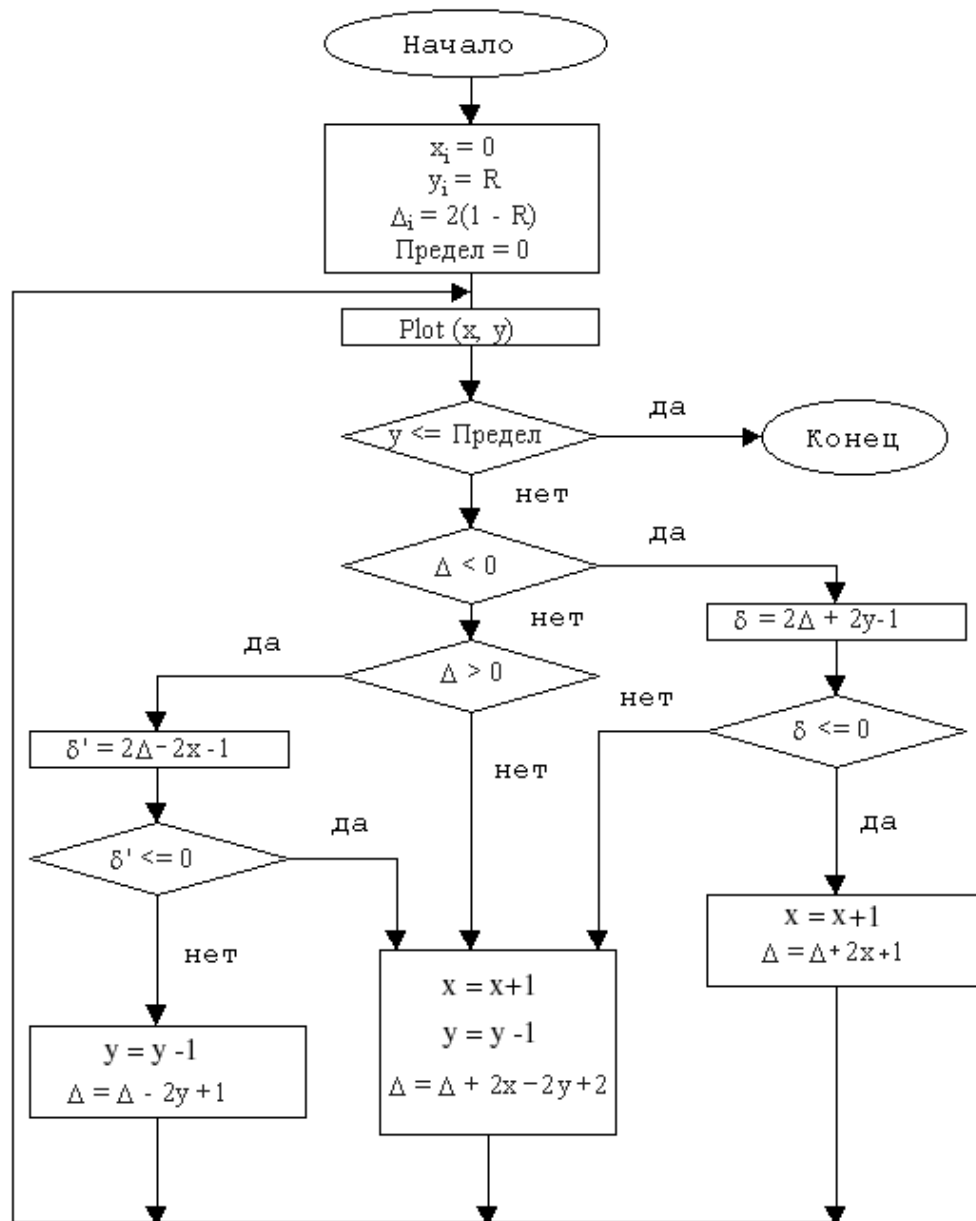


Рисунок 4 Блок-схема алгоритма

Реализация алгоритма Брезенхема на языке С (фрагмент программы) приводится ниже.

// d~Δ p~Предел t~ δ

int x,y,d,t,p;

x = 0;y = R;d = 2*(1 - R);p=0;

wihle(y>p) { putpixel(x,y,color);

if(d<0) { t=2*(d+y)-1; if(t<=0){x++;d+=2*x+1;}else{x++;y--;d+=2*x+2*y-2;}};

else{if(d>0) { t=2*(d-x)-1; if(t<=0){ x++;y--;d+=2*x+2*y-2;}else{y--;d+=2*y+1;}}else{x++;y--;d+=2*x+2*y-2;}} putpixel(x,y,color);

Для иллюстрации работы алгоритма генерации окружности рассмотрим окружность радиуса 8 с центром в начале координат. Генерируется только первый квадрант.(x = 0 y = 8 Предел = 0)

Результаты пошагового выполнения основного алгоритма представлены в таблице.

Plot	Δ_i	δ	δ'	x	y
(0,8)	-14	-13		1	8
(1,8)	-11	-7		2	8
(2,8)	-6	3		3	7
(3,7)	-12	-11		4	7
(4,7)	-3	7		5	6
(5,6)	-3	5		6	5
(6,5)	1		-11	7	4
(7,4)	9		3	7	3
(7,3)	4		-7	8	2
(8,2)	18		19	8	1
(8,1)	17		17	8	0
(8,0)					

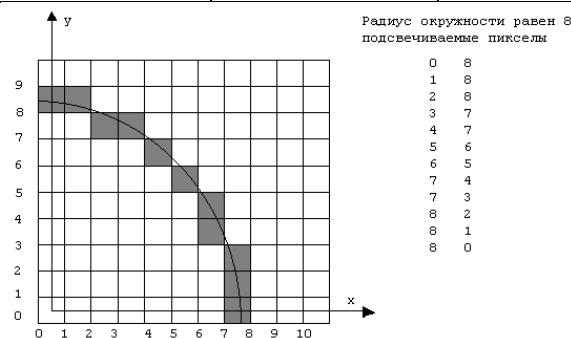


Рисунок 5 Табличные результаты

Табличные результаты показаны на рисунке 5 вместе с реальной окружностью.

2 Практическое задание

Нарисовать в Photoshop 7 изображение атома.



Дневник выполнения:

1. Создаем новый документ (Файл-новый) размером 500X500 пикселей с прозрачным фоном. Заливаем его черным цветом при помощи инструмента "Заливка".

2. Применяем фильтр БЛИК (Фильтр-рендеринг-блик) с параметрами как на рисунке 1.

3. Далее применяем фильтр ПОЛЯРНЫЕ КООРДИНАТЫ (фильтр-искажение-полярные координаты) выбрав ПОЛЯРНЫЕ в ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ. Затем поворачиваем изображение на 180 градусов (Изображение-повернуть холст-180 градусов) и снова применяем фильтр ПОЛЯРНЫЕ КООРДИНАТЫ, только теперь выбираем ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ в ПОЛЯРНЫЕ

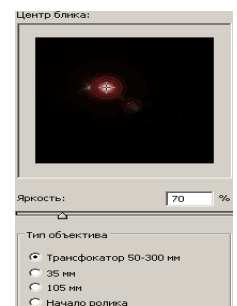


Рисунок 1

4.Активируем инструмент "Овальное выделение" и при нажатой клавише Shift проводим выделение из верхнего левого в правый нижний угол, у нас получилось круглое выделение.

5.Инвертируем выделение (Выделение-инверсия) и нажимаем клавишу Del, тем самым удаляя все лишне. У нас осталась черная сфера с бликом. Снимаем выделение (Выделение-отменить выделение).

6.Уменьшаем нашу сферу при помощи свободной трансформации (Редактирование-свободное трансформирование или клавиатурное сокращение Ctrl+T), на панели задач инструмента нажимаем значек "Сохранить пропорции" и в меняем параметр "Масштабирование по горизонтали" на 45% рисунок 2.



Рисунок 2

7.Теперь поменяем цвет нашей сферы при помощи команды ИЗОБРАЖЕНИЕ-КОРРЕКЦИЯ-ЦВЕТОВОЙ ТОН/НАСЫЩЕННОСТЬ. Устанавливаем флажок в окне ТОНИРОВАНИЕ, а остальные параметры как на рисунке 3.

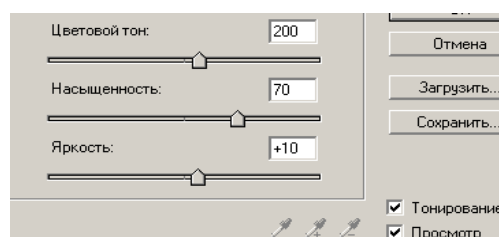


Рисунок 3

8.Создаем новый слой, нажав на кнопку "Создать новый слой" в нижней части палитры СЛОИ. Активируем инструмент "Кисть" выбираем жесткую кисть размером 30 пикселей. Основным цветом выбираем тот цвет, каким у нас получилась сфера. При нажатой клавише Shift проводим кистью от левого края к правому примерно посередине рисунка.

9.Применяем к линии фильтр ПОЛЯРНЫЕ КООРДИНАТЫ, выбираем ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ В ПОЛЯРНЫЕ. У нас получилось "кольцо", нам необходимо трансформировать его при помощи команды РЕДАКТИРОВАНИЕ-ТРАНСФОРМИРОВАНИЕ-ИСКАЖЕНИЕ, чтобы получилось примерно как на рисунке 4.



Рисунок 4

10. Двойным кликом по строке слоя с кольцом вызываем окно "Стили слоя" и выбираем стиль ТИСНЕНИЕ, ВНУТРЕННЯЯ ТЕНЬ и НАЛОЖЕНИЕ ГРАДИЕНТА с параметрами как на рисунке 5

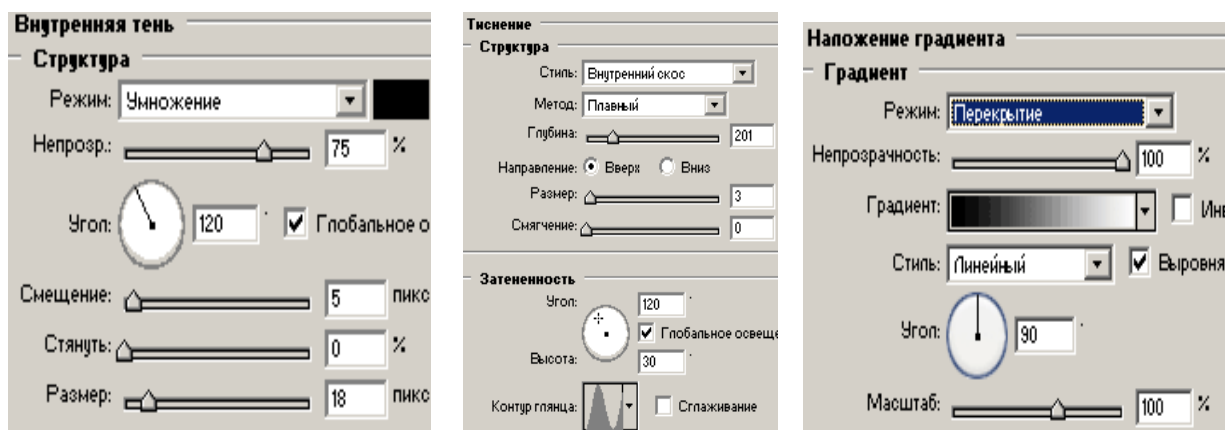


Рисунок 5

11. При нажатой клавише Ctrl кликаем левой кнопкой мыши по строке слоя со сферой на палитре слоев, у нас появилось выделение сферы, при этом активным остался слой с кольцом. Активируем инструмент ластик и стираем ту часть кольца, которая должна быть закрыта сферой.



Снимаем выделение (см. рисунок 6)

12. Делаем еще три копии слоя с кольцом, перетаскивая строку слоя на значек "Создать новый слой" в нижней части палитры СЛОИ. У нас получилось 4 слоя с кольцами. При помощи трансформации поворачиваем каждый слой с кольцом, чтобы получилось примерно как на рисунке 7.

Рисунок 6

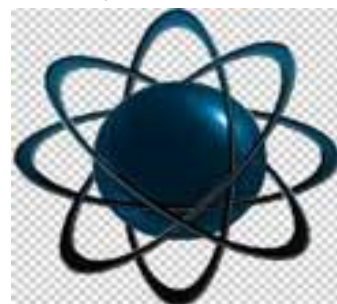


Рисунок 7

13. Копируем слой со сферой и помещаем полученный слой на самый верх слоев. Уменьшаем новую сферу при помощи свободной трансформации (Редактирование - свободное трансформирование или клавиатурное сокращение Ctrl+T), на панели задач инструмента нажимаем значок "Сохранить пропорции" и меняем параметр "Масштабирование по горизонтали" на 25%.

14. Делаем еще три копии слоя с маленькой сферой и при помощи инструмента "Перемещение" (Горячая клавиша V) размещаем маленькие сферы по одной на каждом кольце. Устанавливаем каждому слою с маленькой сферой режим наложения слоя "Умножение", чтобы кольца проглядывали через сферы.

15.Связываем слои с кольцами и маленькими сферами при помощи значка связки рядом со строкой слоя. Затем применяем команду СЛОЙ-ОБЪЕДИНИТЬ СВЯЗАННЫЕ.

16.Копируем полученный слой. Активируем слой, с которого мы делали копию и применяем к нему фильтр СФЕРИЗАЦИЯ (Фильтр-искажение-сферизация), установив параметр СТЕПЕНЬ 50%.

При нажатой клавише Ctrl кликаем левой кнопкой мыши по строке слоя со сферой на палитре слоев, у нас появилось выделение сферы инвертируем выделение (Выделение-инверсия) и нажимаем клавишу Del, чтобы удалить лишнее. Снимаем выделение.

17.Меняем режим наложения слоя на "Перекрытие" и устанавливаем "Непрозрачность" 25%. Так у нас получилось отражение колец на сфере. Теперь можно склеить слои (Слой - объединить видимые). Результат показан на рисунке 8.

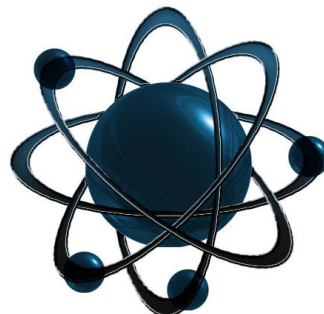


Рисунок 8

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>

Для самостоятельной работы студентов и выполнения лабораторных работ необходимо использовать соответствующее программное обеспечение (смотри пункт 10.2)

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся 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:

Вариант № 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.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Компьютерная графика : метод. указания к выполнению контрольных работ / В. Н. Уланов [и др.]. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2010. – 139 с. (ЭБ)
2. Норенков, И. П. Автоматизированные информационные системы : учеб. пособие для вузов / И. П. Норенков. – М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. – 342 с.

б) дополнительная литература:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 496 с. ЭБС.
2. Геометрическое моделирование в САПР: метод. указания к выполнению контрольных работ / В. Н. Уланов [и др.]. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2012. – 127 с. (ЭБ)
3. Компьютерная геометрия : учеб. пособие для вузов / Н. Н. Голованов [и др.]. – М. : Академия, 2006. – 511 с.
4. Уланов, В. Н. Математические методы в САПР. Использование двумерных аффинных преобразований для построения геометрических моделей объектов : учеб. пособие / В. Н. Уланов, П. И. Комаров. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2007. – 54 с.

5. Уланов, В. Н. Математические методы в САПР. Методы представления и генерации плоских кривых при геометрическом моделировании объектов исследования и проектирования : учеб. пособие / В. Н. Уланов, П. И. Комаров, А. В. Козлов. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2007. – 53 с.

в) вспомогательная литература:

1. Мураховский, В. И. Компьютерная графика : популярная энциклопедия / В. И. Мураховский. – М. : АСТ-Пресс СКД, 2002. – 639 с.
2. Блинова, Т. А. Компьютерная графика / Т. А. Блинова ; под ред. В. Н. Порева. – К. : Юниор ; СПб. : КОРОНА принт, 2006. – 520 с.
3. Гайдуков, С. А. OpenGL : профессиональное программирование трехмерной графики на C++ / С. А. Гайдуков. – СПб. : БХВ-Петербург, 2002. – 639 с.
4. Никулин, Е. А. Компьютерная геометрия и алгоритмы машинной графики / Е. А. Никулин. – СПб. : БХВ-Петербург, 2005. – 576 с.
5. Шабаршин, В.М. Интерфейс и функции специализированного химического редактора ASCD/CHEMSKETCH / В.М. Шабаршин, В.А. Мазур . – Химия : Методика преподавания в школе. 2004, №2 с33
6. Татевский, В.М. Строение молекул./ В.М. Татевский. – М. : Химия, 1977. – 512 с.

Журналы

«САПР и графика» - 2010г +.

«КомпьютерПресс» - 2010 г.+

«Научная визуализация» электронный журнал/ sv-journal.com

Online-журнал «Графика и Мультимедиа»/ graphicon.ru

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы :<http://media.technolog.edu.ru>

Электронно-библиотечные системы:

- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
- «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>;
- Игнатенко Алексей Геометрическое моделирование сплошных тел <https://cgm.computergraphics.ru/content>;
- <http://www.viniti.msk.su/> - Всероссийский институт научной и технической информации ;
- <http://www.icsti.su/portal/index.html> - Международный центр научной и технической информации;
- <http://www.vntic.org.ru/> - Всероссийский научно-технический информационный центр (ВНТИЦ);
- <http://www.gpntb.ru/> - Государственная публичная научно-техническая библиотека (ГПНТБ).

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: СТОСПБГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

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 яв-

ляется:

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

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов 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 почты.

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 7, 8.1	Лицензия по договору с СПбГТИ(ТУ) DreamSpark
Microsoft Visual Studio 2008, 2010, 2012	
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
LibreOffice (Apache OpenOffice.org)	Бесплатная лицензия

10.3. Информационные справочные системы.

Правовые справочные системы «Консультант-Плюс», «Гарант»; патентные базы РОСПАТЕНТА.

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для проведения занятий по дисциплине на кафедре систем автоматизированного проектирования и управления СПбГТИ(ТУ) имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

Наименование компьютерного класса кафедры	Оборудование
Класс интегрированных систем проектирования и управления химико-технологическими процессами	30 посадочных мест. Учебная мебель, пластиковая доска. Персональные компьютеры (15 шт.): двухядерный процессор Intel Core 2 Duo (2,33 ГГц); ОЗУ 4096 Мб; НЖМД 250 Гб; CD/DVD привод, DVD-RW; видеокарта NVIDIA GeForce 8500 GT; звуковая и сетевая карты, встроенные в материнскую плату. Персональные компьютеры объединены в корпоративную вычислительную сеть кафедры и имеют выход в сеть «Интернет».
Класс информационных и интеллектуальных систем	40 посадочных мест. Учебная мебель, пластиковая доска. 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. Персональные компьютеры объединены в корпоративную вычислительную сеть кафедры и имеют выход в сеть «Интернет».
Лекционная аудитория	56 посадочных мест. Учебная мебель. Мультимедийный проектор NEC NP41. Ноутбук Asus а6j на базе процессора Intel Core Duo T2000. Мультимедийная интерактивная доска ScreenMedia.

Лицензионное системное и прикладное программное обеспечение, используемое в учебном процессе по дисциплине, перечислено в подразделе № 10.2.

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

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

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

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОК-7	способностью к самоорганизации и самообразованию	промежуточный
ОПК-2	способность осваивать методики использования программных средств для решения практических задач	промежуточный
ОПК-5	способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности	промежуточный
ПК-2	способность разрабатывать компоненты аппаратно-программных комплексов и баз данных, используя современные инструментальные средства и технологии программирования	промежуточный

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

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	<p>Знает понятие 3D структур веществ и материалов, современные представления о пространственном строении молекул.</p> <p>Знает что такое естественные координаты и может привести примеры описания пространственного строения с использованием естественных координат.</p> <p>Знает правила переносимости, что такое симметрия молекул, пространственная изомерия молекул, поворотная изомерия и конформации.</p> <p>Представляет место геометрического моделирования в области автоматизированного проектирования 3D структур веществ и материалов.</p> <p>Знает технологии проектирования: эскиз-объемная модель, плоский чертеж, а также безбумажные технологии проектирования и производства.</p> <p>Представляет востребованность твердотельного и поверхностного проектирования при моделировании 3D структур веществ и материалов.</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №1-15 к зачету</p>	<p>ОК-7 ОПК-3</p>

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 2	<p>Знает математическое описание. графических элементов на плоскости и пространстве.</p> <p>Знает математические алгоритмы аффинных преобразований на плоскости и в пространстве, а также алгоритмы проективных преобразований и математические модели объектов в пространстве.</p> <p>Имеет представление о каркасных моделях, граничных моделях и сплошных моделях химических объектов</p> <p>Умеет пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических основ компьютерной графики.</p>	Правильные ответы на вопросы №16-24 к зачету	ОК-7 ОПК-3 ПК-2 ПК-8
Освоение раздела № 3	<p>Знает основные задачи визуализации, алгоритмы методов отсечения и методов удаления.</p> <p>Знает математическое описание представления поверхностей полигональными сетками, алгоритмы равномерной закраски поверхностей, закраски методом Гуро и Фонга.</p> <p>Имеет представление об основных задачах геометрической оптики, твёрдотельном моделировании</p> <p>Знает логические операции над твердыми телами, как реализуется дерево построения сложных твердотельных моделей, а также возможности параметризации и редактирования твердотельных моделей проектируемых объектов.</p> <p>Имеет представление об областях применения твердотельных и поверхностных моделей проектируемых объектов.</p> <p>Умеет пользоваться полученными знаниями для разработки программных приложений для изучения геометрических задач визуализации.</p>	Правильные ответы на вопросы №25-39 к зачету	ОК-7 ОПК-3 ПК-8
Освоение раздела № 4	<p>Знает что такое 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.</p> <p>Имеет представление о конвейере ввода/вывода графической информации, пользовательском интерфейсе, использовании аппаратных особенностей графических процессоров и графических адаптеров.</p> <p>Знает стандарты и форматы хранения данных в системах геометрического моделирования, стандарты на разработку графических систем, растровый и векторный способы создания и хранения графической информации.</p> <p>Имеет представление о преимуществах и недостатках растрового и векторного способов хранения графической информации, смешанных форматах хранения графической информации и проблемах конвертирования данных из одной графической системы в другую.</p> <p>Знает классификацию графических систем и основные функциональные возможности современных графических систем геометрического моделирования</p>	Правильные ответы на вопросы №40-49 к зачету	ОК-7 ОПК-3

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 5	<p>Знает универсальные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Умеет использовать 3D Studio Max и Maya для создания моделей молекул.</p> <p>Умеет использовать программу V-Ray для моделирования поверхностей различных материалов (металла, пластика, полупрозрачных и прозрачных материалов) и программу Material Editor для моделирования поверхностей многослойных материалов.</p> <p>Знает специализированные программы 3D графики для проектирования трехмерных моделей веществ и материалов. Умеет использовать программу Chem Bio 3D Ultra для визуализации химических соединений, программы Chem Sketch 3D Viewer и Chem 3D для создания моделей молекул.</p> <p>Имеет представление о построении моделей путем импорта структурных формул, созданных в Chem Draw и построении моделей непосредственно в Chem 3D.</p> <p>Знает как создаются модели различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей). Имеет представление о переводе моделей в структурные формулы путем экспорта в Chem Draw.</p> <p>Владеет программой Hyper Chem для создания моделей молекул.</p> <p>Имеет представление о визуализации молекулярных колебаний методом молекулярной динамики и получения моделей молекул в оптимальной конформации с помощью программ Chem 3D и Hyper Chem.</p> <p>Владеет программой Avogadro в качестве редактора и визуализатора молекул, для молекулярного моделирования и материаловедения.</p>	Правильные ответы на вопросы №50-60 к зачету	ОК-7 ОПК-3 ПК-2 ПК-12

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):
промежуточная аттестация проводится в форме зачета, результат оценивания – «зачтено», «не зачтено».

3. Типовые контрольные вопросы для проведения аттестации (зачета)

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. Алгоритмические фракталы.
41. Геометрические фракталы.
42. Методы компьютерной анимации.
43. Графические примитивы API Windows.
44. Графическая библиотека OpenGL.
45. Программирование графики DirectX.
46. Растровые форматы графических файлов.
47. Векторные форматы графических файлов.
48. Метафайлы.
49. Современные графические системы.
50. Создание 3D моделей молекул в программе Autodesk 3ds Max.
51. Создание 3D моделей молекул в программе Autodesk Maya.
52. Создание 3D моделей молекул в программе Avogadro.
53. Создание 3D моделей молекул в программе ChemSketch 3DViewer.
54. Создание 3D моделей молекул в программе ChemBio3DUltra.
55. Создание 3D моделей молекул в программе HyperChem
56. Создание 3D моделей молекул импортом из ChemDraw их структурных формул.
57. Создание 3D моделей молекул в программе Chem 3D
58. Создание 3D моделей молекул в программе HyperChem
59. Визуализация молекулярных структур в программе Chem 3D.
60. Создание 3D моделей материалов.

- а) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОК-7**
Ответы на вопросы № 1-60
- б) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОПК-2**
Ответы на вопросы № 16-41
- в) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОПК-5**
Ответы на вопросы №1-60
- г) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-2**
Ответы на вопросы № 42-45, № 50-60

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, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП

СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.