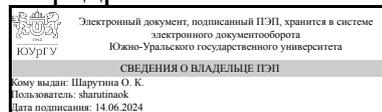


УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



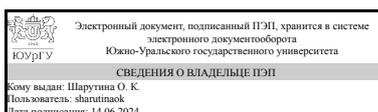
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М1.01 Моделирование структуры многокомпонентных материалов: проектное обучение
для направления 04.04.01 Химия
уровень Магистратура
магистерская программа Хемоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

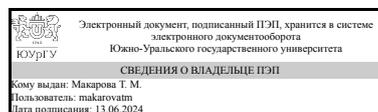
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины является овладение студентом теоретическими основами метода молекулярной динамики и навыками применения данного метода к получению структур многокомпонентных материалов. В рамках этой цели дисциплина выполняет следующие задачи: 1. Освоение теоретических основ метода молекулярно-динамического моделирования и методике его проведения в пакете GROMACS и других вспомогательных программах 2. Построение молекулярно-механических моделей и стартовых систем, необходимых для расчета молекулярной динамики 3. Овладение различными методами молекулярной динамики, с умением настраивать их и управлять ими 4. Анализ траекторий молекулярной динамики и верификация выбранной модели

Краткое содержание дисциплины

В рамках этого курса, составляющего часть проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", студенты научатся самостоятельно выбирать и отлаживать процедуры молекулярного моделирования для воспроизведения структуры и свойств конкретных систем. Дисциплина изучается в рамках программы проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", рассчитанного на 2 года магистратуры. В рамках дисциплины студентам преподаются основные методы работы со структурными файлами и базами данных, построения молекулярно-механических моделей молекул и их систем и, самое главное, различные методы молекулярно-динамического моделирования и их последующая обработка.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-4 Способен к молекулярному моделированию полимеров и биополимеров, их структурных особенностей	Знает: Основы методов молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики Умеет: Осуществлять молекулярно-динамическое моделирование химических систем, в том числе, многокомпонентных; конструировать системы полимеров и биополимеров в ячейке с периодическими граничными условиями Имеет практический опыт: Отладки параметров и условий молекулярно-механического и молекулярно-динамического моделирования высокомолекулярных соединений и многокомпонентных систем с полимерами и/или биополимерами

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
---	---

Нет	Не предусмотрены
-----	------------------

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 14 з.е., 504 ч., 145 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		1	2
Общая трудоёмкость дисциплины	504	252	252
<i>Аудиторные занятия:</i>	128	64	64
Лекции (Л)	0	0	0
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	128	64	64
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	359	179,5	179,5
Подготовка к контрольному мероприятию №9, индивидуальное ПО для моделирования	35	0	35
Подготовка к контрольному мероприятию №8, анализ методов в литературе	35	0	35
Подготовка к контрольному мероприятию №11, изучение взаимодействий	35	0	35
Подготовка к экзамену за I семестр	39,5	39,5	0
Подготовка к контрольному мероприятию №4, оптимизация ячейки	20	20	0
Подготовка к контрольному мероприятию №3, построение топологий	20	20	0
Подготовка к контрольному мероприятию №10, структура методами МД	35	0	35
Подготовка к контрольному мероприятию №5, запуск МД	20	20	0
Подготовка к контрольному мероприятию №2, тест	20	20	0
Подготовка к контрольному мероприятию №1, обзор литературы	30	30	0
Подготовка к экзамену за II семестр	39,5	0	39,5
Подготовка к контрольному мероприятию №6, анализ траекторий	30	30	0
Консультации и промежуточная аттестация	17	8,5	8,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Освоение синтаксиса командной строки и ПО для молекулярного моделирования	12	0	0	12
2	Построение молекулярных моделей компонентов системы	16	0	0	16
3	Освоение ПО GROMACS для молекулярной динамики	18	0	0	18
4	Анализ траекторий моделируемой системы	18	0	0	18
5	Создание авторского ПО для обработки файлов молекулярного моделирования	18	0	0	18
6	Подбор параметров силового поля, метода и условий моделирования для конкретной задачи проекта	16	0	0	16
7	Расчет свойств отдельных компонентов системы для подтверждения модели	12	0	0	12
8	Изучение взаимодействий компонентов в модели многокомпонентной системы	18	0	0	18

5.1. Лекции

Не предусмотрены

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	1	Освоение функционала командной строки	6
2	1	Знакомство с основами ПО GROMACS для моделирования	6
3	2	Подбор состава системы	4
4	2	Построение структур компонентов моделируемой системы	6
5	2	Построение молекулярно-механических моделей компонентов моделируемой системы	6
6	3	Построение элементарной ячейки многокомпонентной системы	6
7	3	Оптимизация энергии структуры многокомпонентной системы	6
8	3	Запуск молекулярной динамики многокомпонентной системы	6
9	4	Расчет общих свойств моделируемой системы	6
10	4	Покадровый анализ полученной траектории	6
11	4	Построение картины межмолекулярных взаимодействий многокомпонентной системы	6
12	5	Освоение алгоритмов автоматизации запуска задач моделирования в bash	6
13	5	Освоение управления процессами и распределенного расчета в Python для запуска задач молекулярного моделирования	6
14	5	Написание авторского комбинированного ПО для управления процессами молекулярного моделирования и обработки его результатов	6
15	6	Выбор оптимального силового поля для изучаемой системы и дополнение его авторскими параметрами	4
16	6	Подбор оптимального режима получения конечной структуры системы	6

		методом молекулярной динамики	
17	6	Подбор алгоритма добавления специальных (в т.ч. полимерных) связей в систему	6
18	7	Расчет геометрических характеристик (преимущ. нековалентных связей) и их изменения во времени	6
19	7	Расчет энергетических характеристик взаимодействия частей системы	6
20	8	Анализ стабильности траектории и кинетических характеристик системы	6
21	8	Анализ потенциальной энергии взаимодействия частей системы	6
22	8	Анализ нековалентных взаимодействий в системе и их энергии	6

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС	
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс
Подготовка к контрольному мероприятию №9, индивидуальное ПО для моделирования	Маккинни, У. Python и анализ данных, гл. 4-6
Подготовка к контрольному мероприятию №8, анализ методов в литературе	База данных Scopus
Подготовка к контрольному мероприятию №11, изучение взаимодействий	Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-7; база данных Scopus
Подготовка к экзамену за I семестр	Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл. 1; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 1-2
Подготовка к контрольному мероприятию №4, оптимизация ячейки	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 2.2-2.3; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл 2.3.6
Подготовка к контрольному мероприятию №3, построение топологий	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6054138/mod_resource/content/1/lecture_3_topologies.pdf ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2.4
Подготовка к контрольному мероприятию №10, структура методами МД	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/8053518/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf ; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл. 2.3.6

Подготовка к контрольному мероприятию №5, запуск МД	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 2.2-2.3; Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко "Современные методы молекулярного моделирования", гл 2.3.6
Подготовка к контрольному мероприятию №2, тест	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6054138/mod_resource/content/1/lecture_3_topologies.pdf ; Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-6
Подготовка к контрольному мероприятию №1, обзор литературы	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 1-2; база данных Scopus
Подготовка к экзамену за II семестр	Х.-Д. Хельтье и др. "Молекулярное моделирование : теория и практика" гл 1-2; Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров", гл 4-8
Подготовка к контрольному мероприятию №6, анализ траекторий	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6339006/mod_resource/content/1/lecture_4.5.pdf

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	1	Текущий контроль	Индивидуальное задание по поиску информации о моделируемой системе	1	5	5 баллов -- литературный обзор проведен, похожие статьи обобщены, результаты четко и понятно сведены в общую таблицу, в работе не менее 30% работ за последние 5 лет 4 балла -- относительно предыдущего, недостаточно статей за последние 5 лет или есть ошибки в оформлении 3 балла -- практически нет статей за последние 5 лет, таблица заполнена не полностью, формулировки нечеткие 2 балла -- статей сильно меньше, чем их выдает поисковая система,	экзамен

						оформлено с грубыми ошибками 1 балл -- обзор практически отсутствует 0 баллов -- обзор отсутствует	
2	2	Текущий контроль	Тест "Молекулярно-механическая модель"	1	10	За каждый ответ на вопрос начисляется от 0 до 1. Полностью правильный ответ оценивается в 1 балл, при множественном выборе из n правильных и m неправильных вариантов за каждый правильный вариант начисляется по 1/n баллов, а за каждый выбранный неправильный вариант вычитается 1/m баллов.	экзамен
3	1	Текущий контроль	Построение молекулярно-механических моделей молекул	1	5	Максимальный балл дается за все правильно построенные модели молекул По 1 баллу вычитается за существенные недочеты при построении для каждой из молекул (например, ошибки в зарядах)	экзамен
4	1	Текущий контроль	Построение элементарной ячейки	1	5	5 баллов -- соблюдены соотношения компонентов, все процедуры выполнены правильно По 1 баллу снимается за каждую существенную ошибку в построении, влияющую на результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю.	экзамен
5	1	Текущий контроль	Запуск молекулярной динамики	1	5	5 баллов -- соблюдены все параметры МД, в том числе температурный режим, способствующий правильной конденсации компонентов По 1 баллу снимается за каждую существенную ошибку в построении и в протоколе оптимизации, влияющую на результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю.	экзамен
6	1	Текущий контроль	Анализ траекторий молекулярной динамики средствами GROMACS	1	5	5 баллов -- выполнены все виды анализа, без ошибок и построены все таблицы и графики, указанные в задании По 1 баллу снимается за каждый невыполненный элемент задания, за каждую существенную ошибку в построении и в протоколе оптимизации, влияющую на	экзамен

						результат, а также за просрок сдачи задания на каждую неделю.	
7	1	Промежуточная аттестация	Экзамен за I семестр	-	10	<p>Оценка за экзамен состоит из 5 баллов за презентацию и 5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы.</p> <p>5 баллов за презентацию состоят из:</p> <p>1 балла -- за наличие всех разделов в презентации (введения, целей и задач, результатов, выводов, планов на будущее), чье содержание соответствует теме проекта и областью работы каждого студента над индивидуальной задачей в проекте</p> <p>2 балла -- за полное и достоверное представление результатов, корректные выводы из них</p> <p>1 балл -- за графическую составляющую, корректные, аккуратные и читаемые графики и схемы, а также общее расположение элементов презентации</p> <p>1 балл -- за полную информацию о процедурах и условиях моделирования в каждом конкретном действии, представленную на основных или же дополнительных слайдах</p> <p>5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы состоят, в свою очередь, из:</p> <p>1 балл -- доклад изложен за отведенное время, четко, последовательно, без крупных запинок.</p> <p>1 балл -- в докладе полно и достоверно изложены цели, задачи, результаты и выводы, соответствующие индивидуальной задаче студента в проекте; содержание презентации полностью соответствует докладу</p> <p>3 балла -- ответы на дополнительные вопросы.</p>	экзамен
8	2	Текущий контроль	Анализ современной литературы относительно валидации модели	1	5	5 баллов -- анализ литературы проведен, учтены все статьи в Scopus по теме, похожие статьи обобщены, результаты четко и	экзамен

					<p>понятно сведены в общую таблицу, в работе не менее 30% работ за последние 5 лет</p> <p>4 балла -- относительно предыдущего, недостаточно статей за последние 5 лет или есть ошибки в оформлении</p> <p>3 балла -- практически нет статей за последние 5 лет, таблица заполнена не полностью, формулировки нечеткие</p> <p>2 балла -- статей сильно меньше, чем их выдает поисковая система, оформлено с грубыми ошибками</p> <p>1 балл -- обзор практически отсутствует</p> <p>0 баллов -- обзор отсутствует</p>		
9	2	Текущий контроль	Написание индивидуального ПО для молекулярного моделирования	1	10	<p>8 баллов дается за полностью корректно работающую программу, еще 2 балла - за грамотное использование элементов объектно-ориентированного программирования внутри нее. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 1 баллу. Также по 1 баллу снимается за каждую неделю просрочки.</p>	экзамен
10	2	Текущий контроль	Построение структуры многокомпонентного материала методами молекулярной динамики	1	5	<p>Оценка складывается из составляющих:</p> <p>3 балла -- построение структуры многокомпонентного материала выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки.</p> <p>2 балла -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.</p>	экзамен
11	2	Текущий контроль	Индивидуальное задание в рамках проекта по изучению взаимодействий в многокомпонентной системе	1	5	<p>Оценка складывается из составляющих:</p> <p>4 балла -- задание по валидации построенной модели выполнено полностью, правильно и в срок. По 0,5 балла снимается за каждую</p>	экзамен

					<p>ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки.</p> <p>1 балл -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.</p>		
12	2	Промежуточная аттестация	Экзамен за II семестр	-	10	<p>Оценка за экзамен состоит из 5 баллов за презентацию и 5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы.</p> <p>5 баллов за презентацию состоят из:</p> <p>1 балла -- за наличие всех разделов в презентации (введения, целей и задач, результатов, выводов, планов на будущее), чье содержание соответствует теме проекта и областью работы каждого студента над индивидуальной задачей в проекте</p> <p>2 балла -- за полное и достоверное представление результатов, корректные выводы из них</p> <p>1 балл -- за графическую составляющую, корректные, аккуратные и читаемые графики и схемы, а также общее расположение элементов презентации</p> <p>1 балл -- за полную информацию о процедурах и условиях моделирования в каждом конкретном действии, представленную на основных или же дополнительных слайдах</p> <p>5 баллов -- за доклад и ответы на вопросы состоят, в свою очередь, из:</p> <p>1 балл -- доклад изложен за отведенное время, четко, последовательно, без крупных запинок.</p> <p>1 балл -- в докладе полно и достоверно изложены цели, задачи, результаты и выводы, соответствующие индивидуальной задаче студента в проекте; содержание презентации полностью соответствует докладу</p>	экзамен

					3 балла -- ответы на дополнительные вопросы.	
--	--	--	--	--	--	--

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру экзамена. Экзамен проводится в форме презентации студентом результатов своей работы по проекту (первичное построение и отработка молекулярно-механической модели компонентов системы) и ответа им на дополнительные вопросы, в т. ч. по теории молекулярного моделирования.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения
экзамен	Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру экзамена. Экзамен проводится в форме презентации студентом результатов своей работы по проекту (модификация молекулярно-механических моделей под конкретную систему, построение модели многокомпонентной системы) и ответа им на дополнительные вопросы, в т. ч. по теории молекулярного моделирования.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ											
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
ПК-4	Знает: Основы методов молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики	+	+	+				+	+				+
ПК-4	Умеет: Осуществлять молекулярно-динамическое моделирование химических систем, в том числе, многокомпонентных; конструировать системы полимеров и биополимеров в ячейке с периодическими граничными условиями				+	+	+	+		+			+
ПК-4	Имеет практический опыт: Отладки параметров и условий молекулярно-механического и молекулярно-динамического моделирования высокомолекулярных соединений и многокомпонентных систем с полимерами и/или биополимерами				+	+	+	+		+		+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Физика твердого тела Учеб. пособие для вузов, изучающих курс физики твердого тела И. К. Верещагин, С. М. Кокин, В. А. Никитенко и др.;

Под ред. И. К. Верещагина. - 2-е изд, испр. - М.: Высшая школа, 2001. - 236,[1] с. ил.

2. Макарова Т. М. Молекулярно-динамическое моделирование посредством программного пакета GROMACS 2019.4 : метод. указания для магистрантов направления 04.04.01 "Химия" / Т. М. Макарова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск : Издательский центр ЮУрГУ, 2022. - 35, [1] с.

б) дополнительная литература:

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] учеб. пособие для вузов по хим. специальностям В. И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 382, [1] с. ил.

2. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика Т. 3 Квантовая механика. Нерелятивистская теория В 10 т.: Учеб. пособие для физ. спец. ун-тов. - 4-е изд., испр. - М.: Наука, 1989. - 768 с.

3. Фейнман, Р. Ф. Фейнмановские лекции по физике [Текст] Вып. 8-9 Квантовая механика учеб. пособие : в 9 вып. Р. Ф. Фейнман, Р. Б. Лейтон, М. Сэндс ; пер. с англ. Г. И. Копылова ; под ред. Я. А. Смородинского. - Изд. 8-е. - М.: URSS : ЛИБРОКОМ, 2014. - 523, [1] с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:
Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"

2. Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко Современные методы молекулярного моделирования

3. Шнейвайс А.Б. Азы GNUPLOTa

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"

2. Д.В. Зленко, П.А. Мамонов, А.М. Нестеренко Современные методы молекулярного моделирования

3. Шнейвайс А.Б. Азы GNUPLOTa

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Войтов, Н. М. Основы работы с Linux. Учебный курс : учебное пособие / Н. М. Войтов. — Москва : ДМК Пресс, 2010. — 216 с. — ISBN 978-5-94074-148-0. — Текст : электронный https://e.lanbook.com/book/1198
2	Основная литература	Электронно-библиотечная	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. - Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г.

		система издательства Лань	Фолькерс ; перевод с английского А. А. Олиференко [и др.]. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 322 с. — ISBN 978-5-00101-724-0. — Текст : электронный https://e.lanbook.com/book/151560
3	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Маккинни, У. Python и анализ данных / У. Маккинни ; перевод с английского А. А. Слинкина. — 2-ое изд., испр. и доп. — Москва : ДМК Пресс, 2020. — 540 с. — ISBN 978-5-97060-590-5. — Текст : электронный https://e.lanbook.com/book/131721

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. -Firefly(бессрочно)
3. -Python(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -The Cambridge Crystallographic Data Centre(31.12.2023)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
	207 (1а)	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, 18 ядер
	208 (1а)	Персональные компьютеры, проектор