ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей кафедрой

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Шарутина О. К.
Пользователь: sharutinaok
Дата подписания: 14.06.2024

О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М1.03.01 Молекулярное моделирование полимеров и биополимеров: 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.

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Шарутина О. К.
Пользователь: sharutinaok
Дата подписания: 14.06.2024

О. К. Шарутина

Разработчик программы, к.хим.н., доцент

Электронный документ, подписанный ПЭП, хранится в системе электронного документооборота Южно-Уральского государственного университета
СВЕДЕНИЯ О ВЛАДЕЛЬЦЕ ПЭП
Кому выдан: Макарова Т. М.
Пользователь: makarovatm
Дата подписания: 14.06.2024

Т. М. Макарова

Челябинск

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины является обретение студентами опыта самостоятельного построения молекулярно-динамических моделей сложных систем, содержащих в своем составе полимеры и/или биополимеры; также значительная часть курса посвящена освоению вспомогательных методов автоматизации процедур моделирования и анализа данных. Задачами на пути к этой цели являются: 1. Построение произвольных структур мономеров и их визуальная обработка в программе PyMOL 2. Освоение специализированного ПО для работы с файлами молекулярного моделирования 3. Создание авторских программ и скриптов для запуска сложносоставных алгоритмов расчета и анализа траекторий

Краткое содержание дисциплины

В рамках данного курса студенты погружаются в процесс молекулярно-динамического моделирования сложных систем, содержащих в своем составе полимеры и/или биополимеры согласно задаче проектного обучения. В рамках этого курса студентам предстоит построить молекулярно-механические модели мономеров, научиться управлять процессами моделирования и анализировать полученные траектории.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-6 Способен выбирать и применять методы моделирования атомно-молекулярных систем к различным типам химических соединений и получать достоверные структурные модели	Знает: Теоретические основы различных методов моделирования атомно-молекулярных систем Умеет: Моделировать структурные параметры различных химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов Имеет практический опыт: Подбора параметров и отладки способов получения равновесной структуры для химических соединений и многокомпонентных систем; выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Нет	Производственная практика (преддипломная) (4 семестр)

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 8 з.е., 288 ч., 58,75 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		2	3
Общая трудоёмкость дисциплины	288	144	144
Аудиторные занятия:	32	16	16
Лекции (Л)	0	0	0
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	32	16	16
Самостоятельная работа (СРС)	229,25	111,75	117,5
Подготовка к контрольному мероприятию №1, структуры	15	15	0
Подготовка к контрольному мероприятию №2, PyMOL	15	15	0
Подготовка к зачету за I семестр	31,75	31.75	0
Подготовка к контрольному мероприятию №7, ООП	20	0	20
Подготовка к контрольному мероприятию №4, основы awk	20	20	0
Подготовка к контрольному мероприятию №3, язык bash	15	15	0
Подготовка к экзамену за II семестр	37,5	0	37.5
Подготовка к контрольному мероприятию №10, изучение свойств полимера	20	0	20
Подготовка к контрольному мероприятию №8, процессы в Python	20	0	20
Подготовка к контрольному мероприятию №5, редактор vim	15	15	0
Подготовка к контрольному мероприятию №9, скрипт bash	20	0	20
Консультации и промежуточная аттестация	26,75	16,25	10,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	зачет	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Построение молекулярно-механической модели полимеров и биополимеров	6	0	0	6
2	Освоение ПО для запуска сложных алгоритмов молекулярного моделирования	8	0	0	8
3	Особенности молекулярно-динамического моделирования	6	0	0	6

	полимеров и биополимеров				
4	Валидация модели полимера или биополимера и изучение его свойств	12	0	0	12

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	Построение структуры полимера или биополимера	2
2	1	Построение молекулярно-механической модели (био)полимера	4
3	2	Использование скриптов bash для алгоритмизирования процедур молекулярного моделирования	4
4	2	Использование возможностей awk и vim для быстрой обработки файлов данных	4
5	3	Подбор параметров молекулярной динамики для отверждения полимера	2
6	3	Введение сшивок (отверждение) полимера	4
7	4	Расчет физических свойств полученной модели полимера	6
8	4	Валидация полученной модели полимера	6

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС	
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс
Подготовка к контрольному мероприятию №1, структуры	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5467760/mod_resource/content/3/lecture_2_SMILES_PyMOL Х.-Д. Хельтье и др. Молекулярное моделирование : теория и практика, гл 2.1
Подготовка к контрольному мероприятию №2, PyMOL	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5467760/mod_resource/content/3/lecture_2_SMILES_PyMOL
Подготовка к зачету за I семестр	Войтов НМ Основы работы с Linux Учебный курс, гл. 8, гл. 1-8; В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. Методы компьютерного моделирования для исследования полиме и биополимеров, гл. 1-2
Подготовка к контрольному мероприятию №7, ООП	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/8053518/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf; Маккинни, У. Python и анализ данных, гл. 7-8
Подготовка к контрольному	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5311595/mod_resource/content/5/lecture_bash_awk.pdf; Войт НМ Основы работы с Linux Учебный курс, гл. 6.3

мероприятию №4, основы awk	
Подготовка к контрольному мероприятию №3, язык bash	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5311595/mod_resource/content/5/lecture_bash_awk.pdf; Войт Н. М. Основы работы с Linux, гл. 3-5
Подготовка к экзамену за II семестр	Неелов И.М. Введение в молекулярное моделирование биополимеров, разделы 2-4; В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. "Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров ", гл. 1-3
Подготовка к контрольному мероприятию №10, изучение свойств полимера	В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. "Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров ", гл. 18; база данных Scopus
Подготовка к контрольному мероприятию №8, процессы в Python	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/8053518/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf
Подготовка к контрольному мероприятию №5, редактор vim	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5865635/mod_resource/content/1/lecture_vim_regexp.pdf; Boi НМ Основы работы с Linux Учебный курс, гл. 8
Подготовка к контрольному мероприятию №9, скрипт bash	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/7888718/mod_resource/content/1/lecture_bash_1.pdf; https://edu.susu.ru/pluginfile.php/7969003/mod_resource/content/2/lecture_bash_2.pdf; Войтов "Основы работы с Linux: Учебный курс", гл 12

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	Учи-тыва-ется в ПА
1	2	Текущий контроль	Форматы структурных данных	1	5	В задаче начисляется по 1 баллу за каждую построенную и отображенную молекулу; минус 0,5 баллов за существенные недочеты при построении для	зачет

						каждой из молекул (грубые ошибки в валентностях и представлении функциональных групп, отсутствие рисунков, ошибки в замыкании колец); минус 0,25 баллов за небольшие недочеты при построении каждой из молекул (неверный оптический изомер, опечатки).	
2	2	Текущий контроль	Программа PyMOL для визуализации молекулярных систем	1	3	В задании начисляется по 1 баллу за каждую правильно построенную и отображенную молекулу; минус 0,5 баллов за существенные недочеты при построении для каждой из молекул (неразборчивый ракурс на картинке, неотображение надписей и др.).	зачет
3	2	Текущий контроль	Работа со структурными файлами в командной строке Linux	1	5	В задании начисляется по 1 баллу за каждое правильно выполненное задание. По 0,5 балла снимается за каждый существенный недочет, искажающий результат команды или делающий ее частным случаем поставленного задания.	зачет
4	2	Текущий контроль	Использования языка скриптования awk для обработки файлов для молекулярного моделирования	1	5	В задании начисляется по 1 баллу за каждое правильно выполненное задание. По 0,5 балла снимается за каждый существенный недочет, искажающий результат команды или делающий ее частным случаем поставленного задания.	зачет
5	2	Текущий контроль	Применение возможностей текстового редактора Vim для файлов молекулярного моделирования	1	5	В задании начисляется по 1 баллу за каждое правильно выполненное задание. По 0,5 балла снимается за каждый существенный недочет, искажающий результат команды или делающий ее частным случаем поставленного задания.	зачет
6	2	Проме-жуточная аттестация	Зачетная задача	-	5	Суммарная оценка за задание – 5 баллов, причем 2 балла ставится за корректный код bash, а 3 балла – за корректные вспомогательные программы на Python. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи,	зачет

						снимается по 0,5 баллов.	
7	3	Текущий контроль	Использования объектно-ориентированного подхода на Python для обработки файлов молекулярного моделирования	1	5	За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов. За неоптимальность кода оценка не снижается, но все подобные случаи будут разобраны на занятии.	экзамен
8	3	Текущий контроль	Управление процессами задач молекулярного моделирование посредством Python	1	5	За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	экзамен
9	3	Текущий контроль	Использование скриптов bash для автоматизации процесса молекулярного моделирования	1	5	Задание 1-3 оцениваются в 1 балл, задание 4 -- в 2 балла. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов. За неоптимальность кода оценка не снижается, но все подобные случаи будут разобраны на занятии.	экзамен
10	3	Проме-жуточная аттестация	Изучение свойства (био)полимера в молекулярно-динамической модели	-	5	Оценка складывается из составляющих: 3 балла -- подбор параметров силового поля выполнен полностью, правильно и в срок. По 0,5 баллов снимается за каждую ошибку в исполнении, искажающую конечный результат или за каждую неделю задержки. 2 балла -- результат задания представлен в виде наглядного отчета, все результаты описаны, в том числе графиками и таблицами.	экзамен
11	3	Проме-жуточная аттестация	Экзамен	-	10	Каждый теоретический вопрос оценивается в 2 балла, выполнение задачи -- в 6 баллов. За каждую фактическую ошибку, отсутствие нужных формул или деталей, из баллов за вопрос	экзамен

						отнимается 0,5 баллов. За каждую ошибку в осуществляемых процедурах, приводящую к искажению результатов, с задания снимается по 1 баллу.	

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. На экзамене студенту предлагается ответить на 2 теоретических вопроса и выполнить практическую задачу по молекулярному моделированию.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения
зачет	Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру зачета. Для прохождения процедуры зачета студенту необходимо написать скрипт-программу, запускающую определенные процедуры подготовки системы, или сложный протокол молелирования либо анализа траекторий.	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
ПК-6	Знает: Теоретические основы различных методов моделирования атомно-молекулярных систем	+	+	+	+		+					+
ПК-6	Умеет: Моделировать структурные параметры различных химических соединений и многокомпонентных систем с применением различных методов молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов					+	+	+	+	+		+
ПК-6	Имеет практический опыт: Подбора параметров и отладки способов получения равновесной структуры для химических соединений и многокомпонентных систем; выбора и применения комбинации методов получения достоверной структурной модели						+				+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Семчиков, Ю. Д. Высокомолекулярные соединения [Текст] учебник для вузов по специальности и направлению "Химия" Ю. Д. Семчиков. - 5-е изд., стер. - М.: Академия, 2010. - 366, [1] с. ил.

б) дополнительная литература:

1. Физическая и коллоидная химия [Текст] Ч. 1 Физическая химия учеб. пособие для вузов по естественнонауч. и инж.-техн. направлениям : в 2 ч. В. Ю. Конюхов и др.; под ред. В. Ю. Конюхова и К. И. Попова. - 2-е изд., испр. и доп. - М.: Юрайт, 2018. - 257, [2] с. ил.
2. Шур, А. М. Высокомолекулярные соединения Учебник для хим. фак. ун-тов Отв. ред. И. Л. Погребной; Кишинев. гос. ун-т им. В. И. Ленина. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Высшая школа, 1981. - 656 с. ил.

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

Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o_18160#1
2. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"
3. Неелов И.М. Введение в молекулярное моделирование биополимеров

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o_18160#1
2. Жмуров А.А., Барсегов В.А. "Молекулярное моделирование с использованием графических процессоров"
3. Неелов И.М. Введение в молекулярное моделирование биополимеров

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Кручинин, Н. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование макромолекул : учебное пособие / Н. Ю. Кручинин. — Оренбург : ОГУ, 2018. — 103 с. — ISBN 978-5-7410-2143-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/159840
2	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 // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/1198
3	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Молекулярное моделирование: теория и практика : учебное пособие / Х. -. Хёльтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. 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
4	Дополнительная литература	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. -Python(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Нет

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