

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Должность: врио ректора

Дата подписания: 05.09.2022 08:34:44

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08



Утверждаю:

Руководитель ООП

П.М. Пахомов

28 апреля 2021 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
Имитационные методы моделирования

Направление подготовки

04.04.01 химия

Направленность (профиль)

Физическая химия

Для магистрантов 1 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Виноградова М.Г. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Целью освоения дисциплины является: познакомить студентов с основными идеями и методами математического моделирования и их применением в различных областях химии и химических приложений с учетом основных требований информационной безопасности, а также способности к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации.

Задачами освоения дисциплины являются:

- -освоение методов моделирования молекулярных систем,
- -понимание места теоретических подходов в решении конкретных физико-химических задач в материаловедении, биофизических приложениях, нанотехнологии.

2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина «Имитационные методы моделирования» входит в Элективные дисциплины 2 обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Имитационные методы моделирования» занимает важное место в процессе подготовки, поскольку, с одной стороны, ее можно отнести к категории мировоззренческих, она призвана сформировать представление о единой физической, химической и информационной картине мира, значении физико-химических и информационных процессов в соответствующих областях человеческой деятельности, а также о существующих научных методах их описания. С другой стороны, она служит основой для практического освоения стандартных и специализированных информационных технологий, необходимых для решения стандартных задач профессиональной деятельности, в том числе для эффективного поиска и первичной обработки научной и научно-технической информации.

Предварительные знания и навыки:

Для успешного освоения дисциплины необходимы знания и навыки, полученные в ходе освоения общего материалов первых учебных семестров, Практическое владением компьютерными навыками и работе в сети Интернет.

Дальнейшее использование:

Полученные в ходе изучения дисциплины знания, умения и навыки используются в научно-исследовательской работе, учебной и производственной практике, при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины:

6 зачетных единиц, 216 академических часа, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции 15 часов, лабораторные работы - 45 часов, в т. ч. лабораторная практическая подготовка - 45 часов;

контактная внеаудиторная работа: контроль самостоятельной работы 10 часов;

самостоятельная работа: 119 часов, контроль – 27 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Семестр
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	1
ОПК-2 Способен выбрать методы сбора вычисленных данных и обработки	ОПК-2-1 имитация стационарных процессов и процессов вероятностных – стохастических. ОПК-2-1 выборочные средине, их надежность на интервале значений существенных переменных.	1,2
ОПК-3 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной	ОПК-3.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; ОПК-3.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-	1,2

области химии или смежных наук	теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.	
--------------------------------	---	--

5. Форма промежуточной аттестации и семестр проведения:
экзамен во 2-м семестре.

6. Язык преподавания: русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа, в том числе контроль (час.)
		Лекции	Семинарские/ Практические занятия/ Лабораторные работы (оставить нужное)	Контроль самостоятельной работы (в том числе курсовая работа)	
1	2	3	4	5	6
1. Введение. Компьютерное моделирование физико-химических систем методами подобия (имитации)	14	-	8	4.5	1.5
2. Типы открытых, закрытых и замкнутых физико-химических систем	13	2.5	5	3	3
3. Элементы физико-химических систем: Атомы, химические связи, молекулы, агрегаты. Макромолекулы, гели и сетки. Третичные структуры белков, клеточные мембраны. Низкомолекулярные компоненты химических систем.	28	6	17	1.5	4
4. Пользовательские интерфейсы компьютерных программ. Графические и текстовые интерфейсы	17	10	2.5	3.5	2.5
5. Силы в физико-химических системах, существенные переменные.	9	1	4	1.5	2.5

6. Химическая связь. Межмолекулярные взаимодействия	10	2.5	4	2.5	1
7. Целевые функции в физико-химических системах и процессах	11.5	2.5	4	2.5	2.5
Итого 1 семестр:	102	17	50	19	17
8.Компьютерная сборка системы. Химические реакции и синтез и их компьютерная имитация..	10	1	1.5	4	3
9. Основы химии твердого тела.	4	1	-	2	1
10. Периодические граничные условия в компьютерном моделировании.	5	1	2	1	1
11. Геометрические характеристики элементов физико-химических систем их точность в расчете и эксперименте.	9	1	3	3	2.5
12. Наглядность систем при их представлении на экране компьютера Вывод изображений отдельных компонент систем и манипулирование.	11	1	5	2	2,5
13. Автоматический конформационный анализ полимеров.	13	1	5	4,5	3
14. Белки и ДНК. Мутации. Вторичные и третичные структуры	11	1	5,5	3	2
15. Динамическое поведение физико-химических систем. Временные масштабы процессов.	15	1	5,5	5,5	3
16. Временные масштабы процессов доступные в методах молекулярной динамики и броуновской динамики.	13	1	5,5	4	2
17. Концепция псевдоатомов, фантомных химических связей, т.н. радиусы обрезки потенциалов межмолекулярного взаимодействия	14	1	6	4	3
18. Масштабы систем рассчитываемых на параллельных суперкомпьютерах	5	1	1	2	2
19.Точности расчетов в сравнении с экспериментом	3			3	
Итого 2 семестр:	114	42	40	38	26
ИТОГО:	216	28	92	57	43

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
---	-------------	----------------------------

<p>1. Введение. Компьютерное моделирование физико-химических систем методами подобия (имитации)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>2. Типы открытых, закрытых и замкнутых физико-химических систем</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>3. Элементы . физико-химических систем: Атомы, , химические связи ,молекулы, агрегаты. Макромолекулы, гели и сетки. Третичные структуры белков, клеточные мембраны. Низкомолекулярные компоненты химических систем</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>4. Пользовательские интерфейсы компьютерных программ . Графические и текстовые интерфейсы.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>5. Силы в физико-химических системах, существенные переменные Строение атома.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>6. Химическая связь. Межмолекулярные взаимодействия</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>7. Целевые функции в физико-химических системах и процессах</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>8. Компьютерная сборка системы. Химические реакции и синтез и их компьютерная имитация...</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>9. Основы химии твердого тела.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>10. Периодические граничные условия в компьютерном моделировании Водород.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>11. Геометрические характеристики элементов физико-химических систем их точность в расчете и эксперименте</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>12. Наглядность систем при их представлении на экране компьютера Вывод изображений отдельных компонент систем и манипулирование .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций)
<p>13. Автоматический конформационный анализ полимеров .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>14. Белки и ДНК. Мутации. Вторичные и третичные структуры</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>15. Динамическое поведение физико-химических систем. Временные масштабы процессов .</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>16. Временные масштабы процессов. доступные в методах молекулярной динамики и броуновской динамики.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>17. Концепция псевдоатомов, фантомных химических связей, т.н. радиусы обрезки потенциалов межмолекулярного взаимодействия</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

18. Масштабы систем рассчитываемых на параллельных суперкомпьютерах	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
19. Курсовая работа по дисциплине «Имитационные методы моделирования»	<ul style="list-style-type: none"> • написание и оформление курсовой работы 	<ul style="list-style-type: none"> • технология исследовательской деятельности

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

Все модули имеют результатом:

расчетные значения заданных физико-химических величин и графические зависимости и отличаются по сложности.

Критерии оценивания: оцениваются баллами, выставляемыми преподавателем. В состав оценки входит компонента навыков владения компьютером и технической документацией, при выполнении поставленного задания. Все модули описаны в источнике 2 основного списка литературы. Этот практикум выдается магистрантам на первом занятии и рассчитан на использование лицензионного программ, развернутых в составе Электронная образовательная среда ТВГУ, в компьютерном классе 3В.

- Оценочный модуль 1
Начиная Предмет имитационного моделирования
- Оценочный модуль 2
Основы рисования и методы редактирования
- Оценочный модуль 3
Создание малых молекул в 2-D и 3-D изображении
- Оценочный модуль 4
Перемещение, вращение и масштабирование молекул
- Оценочный модуль
Измерение структурных характеристик
- Оценочный модуль 6
Создание полипептида

- Оценочный модуль 7 .
- Выбор и демонстрация структурных элементов молекулы
- Оценочный модуль 8
- Работа с макромолекулами
- Оценочный модуль 9
- Минимизация энергии системы
- Оценочный модуль 10
- Моделирование динамики и состояния равновесия
- Оценочный модуль 11
- Расчёт молекулярных орбиталей
- Оценочный модуль 12
- Взаимодействие воды с N-метилаце-тамидом
- Оценочный модуль 13 .
- Электронные свойства белков
- Оценочный модуль 14
- Протонирование воды
- Оценочный модуль 15
- Молекулярные колебания и переходные состояния аммиака
- Оценочный модуль 16
- Низшее возбужденное электронное состояние этилена
- Оценочный модуль 17
- Конформационный анализ n-бутана
- Оценочный модуль 18
- Описание разделов и команд меню пакета HyperChem – 8
- Edit Commands– команды раздела [Редактирование]
 - Build Commands– команды раздела [Построить]
 - Select Commands– команды раздела [Выбрать]
 - Оценочный модуль 19
- Дополнительные программы для имитационного моделирования

V. Практическая направленность курса.

По согласованию с научным руководителем выпускной работы осуществляется выбор темы и задач с таким расчетом, что полученные результаты используются в выпускной работе магистранта.

а) Основная литература:

1. Каймин В. А., Информатика: Учебник/ 6-е изд. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 285 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат) (Переплёт) ISBN 978-5-16-010876-6
<http://znanium.com/go.php?id=542614>

2. Б.Н.Клюшник и Ю.Г. Папулов, Квантовая механика и квантовая химия. Практикум. Тверской гос. университет, 2014. Номер гос.регистрации электронного издания 0321304993, 2014
3. Hyper Chem Release 7 and 8 Hypercube, Inc. 2002 . 2011/ Manual. Tools for molecular Modeling
4. Spyridon Avramiotis and Georgios Tsaparis Using computer simulations in chemistry problem solving // Chemistry Education Research and Practice, Iss3, 2013
5. С. В. Звонарев ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО Моделирования / Учебное пособие/ Уральский федеральный университет. 124 с, 2019

6. Клинов А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. — Электрон. текстовые данные. — Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2009. — 144 с. — 978-5-7882-0774-2. — Режим доступа:

<http://www.iprbookshop.ru/62483.html>

б) Дополнительная литература:

1. Криштафович, В.И. Физико-химические методы исследования: учебник / В.И. Криштафович, Д.В. Криштафович, Н.В. Еремеева. - Москва: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», 2016. - 208 с. - (Учебные издания для бакалавров). - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-394-02417-7; То же
2. [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=453028>
3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА ИЗОМЕРОВ X-, XY-, XYZ-И XYZU-ЗАМЕЩЕННЫХ АЛЛЕНА D 2 d И АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ИСПАРЕНИЯ, Д.Ю. Нилов, В.М. Смоляков - Журнал физической химии, 2015, стр.63-72

2) Программное обеспечение

- а) Лицензионное программное обеспечение
 - Электронная образовательная среда ТВГУ <https://www.tversu.ru/informatisation/>
 - Origin Pro
 - HyperChem Pro. HyperCube Inc.
 - Microsoft Office
- б) Свободно распространяемое программное обеспечение
 - Chem Office 7.0 2002

- ISISTM/Draw 2.4 2001

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- Международная база данных белков [Protein Data Bank](https://www.rcsb.org/)

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТВГУ
<https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Техническая и учебная литература on-line используемого программного обеспечения, учебные материалы и средства учета на “облачном хранилище” с общим для учебной группы доступом в режиме редактирования.

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины:

Учебная программа:

I. СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ В РЯДУ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ, РОДСТВЕННЫХ БАЗИСНОМУ СОЕДИНЕНИЮ

- Электронная образовательная среда ТВГУ
<https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Университетский центр Интернет
- Компьютерная класс с 10 объединенными в сеть компьютерами со средствами мультимедиа

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел III. Объем дисциплины.	Откорректированы академические часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			