

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Оценочные материалы по дисциплине
Computing methods in biomedicine
Вычислительные методы в биомедицине

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки
Physics Methods and Information Technologies in Biomedicine
«Физические методы и информационные технологии в биомедицине»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.П. Демкин

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Компетенции и индикаторы их достижения, проверяемые данными оценочными материалами

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- УК-1 – способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий;
- ПК-2 – способен использовать свободное владение компьютерными программами анализа многомерных биомедицинских данных в задачах оценки состояния биосистем.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- ИУК-1.1. Выявляет проблемную ситуацию, на основе системного подхода осуществляет ее многофакторный анализ и диагностику.
- ИУК-1.2. Осуществляет поиск, отбор и систематизацию информации для определения альтернативных вариантов стратегических решений в проблемной ситуации
- ИУК-1.3. Предлагает и обосновывает стратегию действий с учетом ограничений, рисков и возможных последствий.
- ИПК-2.1. Знает принципы и методы сбора, обработки и наглядного представления медико-биологической информации.
- ИПК-2.2. Умеет планировать и разрабатывать дизайн медико-биологических исследований с использованием современных компьютерных технологий и программных средств.
- ИПК-2.3. Владеет навыками визуализации, моделирования, анализа результатов биомедицинских исследований.

2. Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания

Элементы текущего контроля:

- практические задания.

Примерные темы практических занятий с примерами заданий (проверяемые ИУК-1.1, ИУК-1.2, ИУК-1.3, ИПК-2.1, ИПК-2.2, ИПК-2.3).

Практическое занятие №1 «Оптимизация геометрии основного электронного состояния в различных методах»

Примеры заданий:

- Провести расчеты в квантово-химическом пакете Gaussian молекул воды, этилена и гуанина комбинируя разные методы и базисные наборы:
 - 1) RHF/STO-3G; RHF/6-31G; RHF/6-31G(d); RHF/6-31G(d,p); RHF/aug-cc-pvDZ;
 - 2) B3LYP/STO-3G; B3LYP/6-31G; B3LYP/6-31G(d); B3LYP/6-31G(d,p); B3LYP/aug-cc-pvDZ ;
 - 3) MP2/STO-3G; MP2/6-31G; MP2/6-31G(d); MP2/6-31G(d,p); MP2/aug-cc-pvDZ.
- Сравнить результаты расчетов по углам и длинам связей с экспериментальными значениями. Сделать выводы.

Практическое занятие №2 «Вычисления колебательных частот»

Примеры заданий:

- Молекула воды: сравнить экспериментальные значения частот с частотами, полученными в ходе расчета. Просчитать всеми методами и базисами. В выводе написать где лучшее согласование.
- Молекула этилена: Визуализировать в Chemcraft колебания и определить их частоту. Найти симметричные и антисимметричные колебания.

– Молекула гуанина: Найти только плоскостные и внеплоскостные колебания с помощью визуализации в Chemcraft.

Практическое занятие №3 «Визуализация молекулярных орбиталей»

Примеры заданий:

– Определить НОМО и LUMO орбитали для каждой молекулы, вычислить основные колебательные частоты молекул.

Практическая работа №4 «Структурный критерий ароматичности. Вычисление индекса НОМА»

Примеры заданий:

– Рассчитать индекс НОМА для заданной молекулы.

Практическая работа №5 «Расчет тензора магнитного экранирования молекул и визуализация спектров ЯМР»

Примеры заданий:

– Рассчитать химические сдвиги в спектрах протонного магнитного резонанса заданной молекулы. Построить качественно спектр ЯМР по найденным химическим сдвигам.

Критерии оценивания:

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, оценки отчетов по практическим занятиям.

Подготовка к практическим занятиям предполагает самостоятельную работу студентов по проведению расчетов, анализу, обработке данных, оформлению отчетов.

Балльная оценка текущего контроля успеваемости студента по данной дисциплине составляет максимум **86 баллов**.

Таблица 2.1

№ п/п	Вид контроля	Количество	Количество баллов за 1 ед. контроля	Сумма
1.	Посещение лекций	6	1	6
2.	Выполнение практических заданий	5	16	80
	ИТОГО			86

Индикаторы балльной оценки практического задания:

– 13-16 баллов – ответ не содержит ошибочных расчетов, элементов и утверждений, максимально полно раскрывает суть каждого вопроса, составлен профессиональным языком, содержит выводы;

– 9-12 баллов – в ответе допущены принципиальные ошибки и неточности в расчетах, ответ содержит упущения, составлен профессиональным языком, содержит выводы;

– 5-8 баллов – ответ содержит несколько ошибок в расчетах, упущения, содержание ответов не полное; составлен профессиональным языком, в выводах допущены неточности;

– 0-4 баллов – ответ содержит многочисленные ошибки в расчетах, упущения, содержание ответов не полное; выводы отсутствуют.

Приведите соответствие полученных баллов к 100-балльной шкале.

Соответствие 100-балльной шкалы оценок 2-альтернативной шкале оценок:

- 0-75 баллов – «незачтено»;
- 75-100 баллов – «зачтено».

3. Оценочные материалы итогового контроля (промежуточной аттестации) и критерии оценивания

Промежуточная аттестация (зачет) в первом семестре возможен по результатам текущей успеваемости (свыше 75 баллов).

В другом случае промежуточная аттестация проводится в форме письменного зачета по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса.

Первые вопросы билетов проверяют формирование УК-1 в соответствии с индикатором ИУК-1.1-ИУК-1.3. Ответы даются в развернутой форме.

Вторые вопросы билетов проверяют формирование ПК-2 в соответствии с индикатором ИПК-2.1-ИПК-2.3. Ответы даются в развернутой форме

Продолжительность зачета – 1 час.

Примерный перечень теоретических вопросов

1. Квантовая химия.
2. Разделы квантовой химии.
3. Уравнение Шрёдингера. В чем его проблематика решения.
4. Метод Хартри-Фока.
5. Теория функционала плотности.
6. Теория возмущений Меллера – Плессе.
7. Гибридные функционалы.
8. Базисные функции.
9. Слэтеровские атомные орбитали.
10. Орбитали Гауссовского типа.
11. Валентно-расщепленные базисные наборы.
12. Поляризационные функции.
13. Диффузные функции.
14. Корреляционно-согласованные базисные наборы.
15. Заряд и мультиплетность.
16. История ароматичности.
17. Бензол. История открытия.
18. Ароматичность.
19. Энергетический критерий ароматичности.
20. Магнитный критерий ароматичности.
21. Химический критерий ароматичности.
22. Структурный критерий ароматичности.
23. Правило Хюккеля.
24. Теория ядерного магнитного резонанса.
25. Химический сдвиг.
26. Квантово-химические пакеты.
27. Chemcraft.
28. Gaussian.
29. Особенности работы Chemcraft.
30. Особенности работы Gaussian.

4. Оценочные материалы для проверки остаточных знаний (сформированности компетенций)

Теоретические вопросы:

1. Квантовая химия. (ИУК-1.1)

Ответ должен содержать определение квантовой химии. Объяснить причину появления данного направления науки. Привести примеры задач решаемых квантовой химией.

2. Разделы квантовой химии. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать по меньшей мере 3 раздела квантовой химии и объяснение с примерами чем занимается тот или иной раздел.

3. Уравнение Шрёдингера. В чем его проблематика решения. (ИУК-1.3)

Ответ должен содержать формулировку уравнения Шрёдингера и объяснение невозможности его аналитического решения для многоатомных систем.

4. Метод Хартри-Фока. (ИУК-1.3)

Ответ должен содержать формулировку метода Хартри-Фока, описание его стадий, особенностей и недостатков.

5. Теория функционала плотности. (ИУК-1.1)

Ответ должен содержать определение теории функционала плотности, описание методов и примеры применения.

6. Теория возмущений Меллера – Плессе. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку основной идеи данной теории.

7. Гибридные функционалы. (ИУК-1.3)

Ответ должен содержать формулировки и примеры гибридных функционалов.

8. Базисные функции. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать определение базисных функций и обоснование их использования. Привести примеры базисных функций.

9. Слэтеровские атомные орбитали. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия слэтеровских атомных орбиталей, примеры их использования, описание их недостатков.

10. Орбитали Гауссовского типа. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия орбиталей Гауссовского типа, примеры их использования, описание их недостатков.

11. Валентно-расщепленные базисные наборы. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия валентно-расщепленных базисных наборов, примеры их использования, описание их недостатков.

12. Поляризационные функции. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия поляризационных функций, примеры их использования, описание их недостатков.

13. Диффузные функции. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия диффузных функций, примеры их использования, описание их недостатков.

14. Корреляционно-согласованные базисные наборы. (ИУК-1.2)

Ответ должен содержать формулировку понятия Корреляционно-согласованных базисных наборов, примеры их использования, описание их недостатков.

15. Заряд и мультиплетность. (ИУК-1.1)

Ответ должен содержать определения заряда молекул и мультиплетности.

16. История ароматичности. (ИУК-1.1)

Ответ должен содержать определение ароматичности и описание появления данной характеристики.

17. Бензол. История открытия. (ИУК-1.1)

Ответ должен содержать описание бензола, его особенностей и историю открытия.

18. Ароматичность. (ИУК-1.3)
Ответ должен содержать определение ароматичности и ее свойства.
19. Энергетический критерий ароматичности. (ИУК-1.2)
Ответ должен содержать определение энергетического критерия ароматичности, описание его достоинств и недостатков.
20. Магнитный критерий ароматичности. (ИУК-1.2)
Ответ должен содержать определение магнитного критерия ароматичности, описание его достоинств и недостатков.
21. Химический критерий ароматичности. (ИУК-1.2)
Ответ должен содержать определение химического критерия ароматичности, описание его достоинств и недостатков.
22. Структурный критерий ароматичности. (ИУК-1.2)
Ответ должен содержать определение структурного критерия ароматичности, описание его достоинств и недостатков.
23. Правило Хюккеля. (ИУК-1.3)
Ответ должен содержать описание предложенного подхода и привести пример.
24. Теория ядерного магнитного резонанса. (ИУК-1.1)
Ответ должен содержать определение явления ядерного магнитного резонанса. Привести примеры применения данной теории на практике.
25. Химический сдвиг. (ИУК-1.1)
Ответ должен содержать определение явления химического сдвига. Объяснить природу явления.
26. Квантово-химические пакеты. (ИПК-1.1)
Ответ должен содержать примеры квантово-химических пакетов и область их применения.
27. Chemcraft. (ИПК-1.2)
Ответ должен содержать описание данного квантово-химических пакета и область его применения. Привести пример решаемой задачи.
28. Gaussian. (ИПК-1.2)
Ответ должен содержать описание данного квантово-химических пакета и область его применения. Привести пример решаемой задачи.
29. Особенности работы Chemcraft. (ИПК-1.2)
Ответ должен содержать описание алгоритма создания цифровой модели молекулы и визуального функционала данного квантово-химических пакета.
30. Особенности работы Gaussian. (ИПК-1.2)
Ответ должен содержать описание алгоритма подготовки, запуска и сбора результатов в квантово-химическом пакете Gaussian.

5. Информация о разработчиках

Лещинский Дмитрий Викторович, м.н.с. лаборатории прогнозирования состояния атмосферы Института оптики атмосферы СО РАН, старший преподаватель кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования, м.н.с. регионального научно-образовательного математического центра, м.н.с. научно-исследовательской лаборатории вычислительной геофизики ТГУ.