

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

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

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
2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.П. Демкин

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

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. Задачи освоения дисциплины

- Изучить методы компьютерного моделирования биологических объектов.
- Изучить методические основы проведения вычислительных расчетов в биомедицине.
- Познакомиться с программным обеспечением биомедицинских систем и устройств.
- Научиться выполнять автоматизированные вычислительные эксперименты, анализировать полученные результаты, отображать результаты моделирования биомедицинских исследований в виде графиков, диаграмм, таблиц и т. д.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

Дисциплина освещает вопросы о физических моделях биологических объектов, видах измерений, проводимых в биомедицине, принципах разработки алгоритмического и программного обеспечения измерительных технологий в биомедицине.

Полученные в рамках дисциплины компетенции необходимы для эффективной организации научно-исследовательской работы и написания выпускной квалификационной работы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 1, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

Специальные компетенции для освоения дисциплины не предусмотрены.

6. Язык реализации

Английский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

– лекции: 12 ч.,

– практические занятия: 12 ч.,

в том числе практическая подготовка: 12 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Введение.

История квантовой химии. Понятие о биологических объектах, основы измерения их параметров на основе квантово-химических расчетов. Анализ ароматических соединений для оценки органических молекул.

Тема 2. Квантово-химические расчеты.

Применение квантово-химических расчетов для решения медицинских задач. Методика квантово-химических расчетов. Квантово-химические пакеты. Основы работы пакетов: Gaussian и Chemcraft. Основные колебательные частоты органических молекул, сравнение с экспериментальными значениями. Визуализация молекулярных орбиталей в молекулах. Визуализация колебаний молекул в программе Chemcraft.

Тема 3. Аromaticность и магнитно-кольцевые токи.

Основные концепции и критерии оценки ароматичности. Ядерно-магнитный резонанс (ЯМР), метод калибровочных магнитно-индуцированных токов. Теоретические основы концепции ароматичности, критерии оценивания ароматичности. Применение ароматических соединений в химии, биологии и медицине. Современные экспериментальные методы оценки ароматичности (связь ароматичности со спектральными и физико-химическими характеристиками). Теория ядерного магнитного резонанса. Теоретические методы оценивания ароматичности: калибровочно-инвариантные магнитно-индуцированные токи (GIMIC).

9. Текущий контроль по дисциплине

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.

Текущий контроль фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в первом семестре возможен по результатам текущей успеваемости. В другом случае промежуточная аттестация проводится в форме письменного зачета по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса. Продолжительность зачета 1 час.

Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26950>;

б) оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Валиев Р. Р. Квантовая химия в спектроскопии: учебное пособие / Р. Р. Валиев; Нац. исслед. Том. гос. ун-т, Физ. фак. - Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2018. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000624091> (access date: 18.01.2024).

2. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул: учебно-методическое пособие. – Томск: Изд-во ТГПУ, 2006. – 146 с.

3. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: Пер. с англ. – М.: Мир. 1984. 478 с.

4. Krygowski T. M., Cyranski M. K. Aromaticity in Heterocyclic Compounds. Springer, V.19, 2009. p.344.

5. Зык Н.В., Белоглазкина Е.К. Ароматичность и ароматические углеводороды: методическая разработка для студентов медицинских факультетов университетов. – М. 1998. 49 с.

6. Fliegl H., Taubert S., Lehtonen O., Sundholm D. The gauge including magnetically induced current method. Phys. Chem. Chem. Phys, 2011, 13.p.18.

7. Pople J.A. Molecular orbital theory of aromatic ring currents / J.A. Pople // Molecular Physics. – 1958. – Vol. 1. – P.175-180.

б) дополнительная литература:

1. Минкин В. И. Теория строения молекул / Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. – учеб. пособие. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997. – 560 с

2. Werner H. J., Knowles P. J. Molpro/ Users Manual, Version 2015.1, - 651 p.

3. Granovsky, A. A. 2012, Firefly, vol 8.0.0, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>

4. Квантовая механика и квантовая химия / С.Л.Хурсан. –конспекты лекций. – Уфа, 2005. – 164 с.

5. Alex, A. A. Quantum Mechanical Calculations in Medicinal Chemistry: Relevant Method or a Quantum Leap Too Far? Comprehensive Medicinal Chemistry II, 2007, 379–420.

6. Fliegl H. Magnetically Induced Current Densities in Aromatic, Antiaromatic, Homoaromatic and Nonaromatic Hydrocarbons / H. Fliegl, D. Sundholm, S. Taubert, J. Jusélius and W. Klopper // J. Phys. Chem. A, 2009. Vol. 113. – P. 8668 -8676.

7. Valiev R.R. Computational Studies of Aromatic and Photophysical Properties of Expanded Porphyrins / R. R. Valiev, I. Benkyi, Y. V. Konyshov, H. Fliegl, D. Sundholm // J. Phys. Chem. A. – 2018. – Vol. 122. – P. 4756-4767.

8. Valiev R. R. Optical and Magnetic Properties of Antiaromatic Porphyrinoids / R. R. Valiev, H. Fliegl, D. Sundholm // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2017. – Vol. 19. – P. 25979-25988.

9. Ethirajan M. The role of porphyrin chemistry in tumor imaging and photodynamic therapy / M. Ethirajan, Y. Chen, P. Joshi, R. K. Pandey // Chem. Soc. Rev. 2011. – Vol. 40. – P. 340-362.

10. Schleyer P. Introduction: Aromaticity // Chemical reviews. – 2001. – Vol.101. – P. 1115–1118.

в) ресурсы сети Интернет:

1. Федеральный портал «Российское образование» – <http://www.edu.ru/>
2. Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» – <http://school-collection.edu.ru/> (access date: 18.01.2024).
3. Научная база по обмену базисными наборами «Basis Set Exchange» <http://www.basissetexchange.org/> (access date: 18.01.2024).

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office Access, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.);

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (при наличии):

14. Материально-техническое обеспечение

Для проведения занятий по дисциплине используется лаборатория моделирования физических процессов в биологии и медицине (аудитория № 442 второго учебного корпуса ТГУ), оснащенная интерактивной доской, звуковым и видеооборудованием, мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, ресурсов сети Интернет, других учебных материалов. Имеются персональные компьютеры студентов, с доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Проведение квантово-химических расчетов происходит с использованием вычислительного кластера СКИФ Cyberia и программного обеспечения – UltraEdit, Chemcraft, WinSCP и Putty.

При организации занятий в дистанционном режиме возможно использование технологий – вебинара, Mind.

Помещения для самостоятельной работы, в том числе расположенные в НБ ТГУ, оснащены компьютерной техникой, имеют доступ к сети Интернет, информационным справочным системам, в электронную информационно-образовательную среду.

15. 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.