

**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОРЛОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.В. ПАРАХИНА»**

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР _____ Калиничева Е.Ю.
_____ 2018 г.



Рабочая программа дисциплины

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Направление подготовки - **19.04.01 – БИОТЕХНОЛОГИЯ**

Направленность подготовки - **БИОТЕХНОЛОГИЯ**

Квалификация - **МАГИСТР**

Форма обучения - **очно-заочная**

Орел 2018 год

Составитель: И к.т.н., доц. Гнеушева И.А. «05» 04 2018 г.

Рецензент: Сергеев к.т.н., доцент Сергеева Е.Ю. «05» 04 2018 г.

Программа разработана в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки биотехнология.

Программа обсуждена на заседании кафедры биотехнологии протокол № 24 от «30» 08 2018 г.

Зав. кафедрой: Павловская д.б.н., проф. Павловская Н.Е. «30» 08 2018 г.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании Ученого совета факультета биотехнологии и ветеринарной медицины протокол № 1 от «30» 08 2018 г.

Декан факультета Ляшук д.с.-х.н., проф. Ляшук Р.Н. «30» 08 2018 г.

Программа принята учебно-методической комиссией по направлению подготовки Биотехнология протокол № 1 от «30» 08 2018 г.

Председатель учебно-методической комиссии по направлению подготовки Биотехнология

Горькова д.т.н., доц. Горькова И.В. «30» 08 2018 г.

Директор научной библиотеки Ишханова Ишханова Е.В. «06» 04 2018 г.

Оглавление

Введение

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины).....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	4
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу (во взаимодействии с преподавателем) обучающихся (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся.....	4
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	5
4.1 Содержание модулей и разделов дисциплины.....	5
4.2 Разделы дисциплин и виды занятий.....	5
4.3 Тематический план лекций.....	7
4.4 Практические занятия.....	8
4.5 Лабораторный практикум.....	8
4.6 Самостоятельная работа обучающихся.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).....	9
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю):.....	9
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля).....	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля).....	10
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).....	11
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).....	11
12. Критерии оценки знаний обучающихся.....	11
13. Приложение.....	13

Введение

Целью дисциплины "Молекулярное моделирование" является ознакомление обучающихся с принципами и методами моделирования полимерных систем на микроуровне, уровне отдельных макромолекул. Обучающиеся научатся понимать закономерности их движения в различных средах, включая биологические макромолекулы (белки, полисахариды) в биологических средах, влияние динамики макромолекул на макроскопические свойства систем, опробуют программы молекулярной динамики в работе. Содержание изучаемой дисциплины направлено на укрепление естественнонаучного мировоззрения студентов, освоение ими научного стиля мышления, глубокого и правильного понимания принципов математического моделирования макромолекул, методов вычислительного эксперимента в химических исследованиях. Планируется ознакомление с современными достижениями в области компьютерного моделирования макромолекулярных объектов и систем; освоение теоретических основ компьютерного моделирования и информатики как средств исследования структурнодинамических свойств полимерных соединений, включая их биологически важные классы, такие как белки и полисахариды; обучение профессиональному владению современными методами молекулярного моделирования нано-био структур.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины).

В результате изучения данной учебной дисциплины у обучающихся формируются компетенции: **профессиональные компетенции (ПК)**, соответствующими видам профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:

- способность использовать типовые и разрабатывать новые методы инженерных расчетов технологических параметров и оборудования биотехнологических производств (ПК-14);

В результате изучения дисциплины "Молекулярное моделирование" обучающийся должен (ПК-14):

Знать основные термины и принципы использования методов инженерных расчетов технологически параметров и оборудования в создании нано-био-структур.

Уметь использовать стандартные виды процедур для сбора конкретной информации по применению биотехнологии в создании нано-био-структур; качественно определять качество биопрепарата.

Владеть основами обработки данных, необходимых для решения экспериментальных задач в области молекулярной биотехнологии в любых стандартных профессиональных ситуациях; современными методами производства БАВ из растительного и животного сырья.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Место дисциплины «Молекулярное моделирование» в структуре магистратуры: дисциплина относится к Блоку 1 Дисциплины (модули), факультативная часть (ФТД.2).

Дисциплина изучается на 2 курсе. Она базируется на знаниях, полученных при изучении ряда независимых наук, таких как основы биохимии и молекулярной биологии, основы биологии и микробиологии, а также общепрофессиональных и специальных дисциплин – основы биотехнологии, прикладная генетическая и белковая инженерия.

Программа дисциплины построена блочно-модульно. В ней выделены разделы: теоретические основы молекулярного моделирования; экспериментально-компьютерное моделирование молекулярных объектов

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу (во взаимодействии с преподавателем) обучающихся (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся.

Таблица 1 - Общая трудоемкость дисциплины 2 зачетные единицы

Вид учебной нагрузки	Всего часов	Курс 2
Контактная работа (всего)	12	12
в том числе:		
Лекции	4	4
из них:	4	4
активные формы обучения		
Практические занятия (ПЗ)		
из них:		
активные формы обучения		
Лабораторные работы (ЛР)	8	8
из них:	8	8
активные формы обучения		
Самостоятельная работа (всего)	60	60
Вид промежуточной аттестации	-	зачет
Общая трудоемкость час/зач. ед	72/2	72/2

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

4.1 Содержание модулей и разделов дисциплины

Таблица 2 - Содержание модулей и разделов дисциплины

Курс 2 (количество модулей 2)			
<p align="center">Модуль I «Теоретические основы молекулярного моделирования».</p> <p><i>Цель:</i> ознакомить обучающихся с основными этапами биотехнологического процесса производства нано-био-структур</p> <p>В результате усвоения данного модуля формируют компетенции ПК- 14</p>			
№ п/п	Наименование раздела дисциплины, входящего в данный модуль.	Содержание раздела	
		контактная работа	СРС
1	История развития метода молекулярной динамики	Инструменты для молекулярного моделирования	Компьютерное молекулярное моделирование
	Преимущества молекулярного моделирования	Основные методы молекулярного моделирования	Методы Монте-Карло и молекулярной динамики

<p>Курс 2 (количество модулей 2)</p>
--

<p>Модуль II «Экспериментально-компьютерное моделирование молекулярных объектов».</p> <p>Цель: ознакомить обучающихся с основными этапами биотехнологического процесса производства нано-био-структур</p> <p>В результате усвоения данного модуля формируют компетенции ПК- 14</p>			
№ п/п	Наименование раздела дисциплины, входящего в данный модуль.	Содержание раздела	
		контактная работа	СРС
2	Молекулярная механика	Использование кластерных систем для молекулярно-динамического моделирования	Многомасштабное моделирование молекулярной динамики органических жидкостей

4.2. Разделы дисциплин и виды занятий

Таблица 3 - Разделы дисциплин и виды занятий

	Раздел дисциплины, входящего в данный модуль	Лекц.	ПЗ	ЛЗ	СРС	Всего часов
Курс 2						
М I	1	2		4	30	36

	Раздел дисциплины, входящего в данный модуль	Лекц.	ПЗ	ЛЗ	СРС	Всего часов
Курс 2						
М II	2	2		4	30	36

4.3. Тематический план лекций

Таблица 4 - Тематический план лекций

	Раздел дисциплины, входящий в данный модуль	Тема лекции	Контактная работа (час.)
Курс 2			
Модуль 1	1	История развития метода молекулярной динамики ПК-14	2
		Преимущества молекулярного моделирования ПК-14	
Модуль II	2	Молекулярная механика ПК-14	2
Итого:			4
вт.ч. в активной форме			4

4.4. Практические занятия

Таблица 5 - Тематический план практических занятий

4.4. Лабораторный практикум

Таблица 5 - Лабораторный практикум

	№ раздела дисциплины, входящего в данный модуль (см.5.1)	Тема лабораторного практикума занятия	Контактная работа (час.)
Курс 2			
Модуль I	1	Молекулярное моделирование полимерных молекул ПК-14	4
Модуль II	2	Топологии в GROMACS ПК-1 Программы и параметры моделирования ПК-14	4
Итого:			8
вт.ч. в активной форме			8

4.5. Самостоятельная работа обучающихся

Таблица 7 Тематический план самостоятельной работы обучающихся

	Самостоятельное изучение теоретического материала	Выполнение домашних заданий и упражнений	Написание реферата	Подготовка к отчету по ДКР	Подготовка презентаций к рефератам, докладам	Работа с интернет-тренажером	Коллоквиум	Трудоемкость (час.)
Курс 2								
Модуль I	1	10		10				30
Модуль II	3		10		10			30
	Всего часов							60

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).

Обучающийся имеет неограниченный доступ к информационно-образовательной среде университета http://80.76.178.26/subject/index/card/subject_id/2186

1. Марголин, В.И. Введение в нанотехнологию [Электронный ресурс] : учебник / В.И. Марголин, В.А. Жабров, Г.Н. Лукьянов, В.А. Тулик. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2012. — 464 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/4310> . — Загл. с экрана.

2. Иванов, И.В. Основы физики и биофизики [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.В. Иванов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2012. — 208 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/3801>. — Загл. с экрана.

3. Краткий курс лекций по молекулярной биологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / сост. Ярован Н.И., Прудникова Е.Г.. — Электрон. дан. — Орел : ОрелГАУ, 2016. — 84 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/91719>. — Загл. с экрана.

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) (Приложение).

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание показателей и критериев оценивания уровня приобретенных компетенций на различных этапах их формирования;
- типовые контрольные задания, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения основной профессиональной образовательной программы:
 - вопросы к зачету;
 - комплект заданий для контрольной работы;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля).

а) основная литература:

1. Павловская, Н.Е. Основы биотехнологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.Е. Павловская, И.В. Горькова, И.Н. Гагарина, А.Ю. Гаврилова. — Электрон. дан. — Орел : ОрелГАУ, 2014. — 208 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/71477>. — Загл. с экрана

2. Емельянов В.В. Биохимия [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Емельянов, Н.Е. Максимова, Н.Н. Мочульская. — Электрон. текстовые данные. — Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2016. — 132 с. — 978-5-7996-1893-3. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/68228.html> — Загл. с экрана

3. Павловская, Н.Е. Основы биотехнологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.Е. Павловская, И.В. Горькова, И.Н. Гагарина, А.Ю. Гаврилова. — Электрон. дан. — Орел : ОрелГАУ, 2013. — 215 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/71482>. — Загл. с экрана.

б) дополнительная литература:

1. Конопатов, Ю.В. Основы экологической биохимии [Электронный ресурс] : 2018-07-12 / Ю.В. Конопатов, С.В. Васильева. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 136 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/107942>. — Загл. с экрана.

2. Егоров, В.В. Теоретические основы биологии с введением в термодинамику живых систем [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Егоров. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 204 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/104870>. — Загл. с экрана.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля).

1. ЭБС издательства «Юрайт» <https://biblio-online.ru/> (<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)

2. ЭБС издательства «Лань» <https://e.lanbook.com/> (<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)

3. ЭБС «IPRbooks» <http://www.iprbookshop.ru/> (<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)

4. Национальный цифровой ресурс «Руконт» <https://rucont.ru/chapter/rucont> (<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)

5. Научная электронная библиотека eLIBRARY <https://elibrary.ru/defaultx.asp>
(<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)
6. Электронный каталог (АИБС «МАРК-SQL»): <http://library.orelsau.ru/marcweb/>
(<http://library.orelsau.ru/els-remote-access-by-subscription.php>)
7. Электронный фонд нормативно-технических документов «Техэксперт»
<http://www.cntd.ru/?yclid=5905194109882823518>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Приступая к изучению дисциплины, обучающимся необходимо внимательно ознакомиться с тематическим планом занятий, списком рекомендованной научной литературы. Следует уяснить последовательность выполнения индивидуальных учебных заданий.

Самостоятельное изучение теоретического материала.

Теоретический материал по тем темам, которые вынесены на самостоятельное изучение, обучающийся прорабатывает в соответствии с вопросами для подготовки к экзамену. К началу сессии обучающийся готовит к аудиторной работе с преподавателем список вопросов, которые не удалось разобрать самостоятельно в межсессионный период.

Подготовка к семинарским занятиям.

В ходе подготовки к семинарскому занятию обучающимся следует внимательно ознакомиться с планом, вопросами, вынесенными на обсуждение, изучить соответствующий лекционный материал, предлагаемую литературу. Нельзя ограничиваться только имеющейся учебной литературой (учебниками и учебными пособиями). Обращение к монографиям, статьям из специальных журналов, хрестоматийным выдержкам, а также к материалам средств массовой информации позволит в значительной мере углубить проблему, что разнообразит процесс ее обсуждения.

С другой стороны, обучающимся следует помнить, что они должны не просто воспроизводить сумму полученных знаний по заданной теме, но и творчески переосмыслить существующее в современной науке подходы к пониманию тех или иных проблем, явлений, событий продемонстрировать и убедительно аргументировать собственную позицию.

В целом же активное заинтересованное участие обучающихся в семинарской работе способствует более глубокому изучению дисциплины, повышению уровня культуры будущих специалистов и формированию основ профессионального мышления. В ходе занятий отрабатываются умения применять полученные теоретические знания в различных ситуациях.

Выполнение домашних тестовых и иных индивидуальных заданий.

Для закрепления теоретического материала обучающиеся по каждой пройденной теме выполняют индивидуальные задания. Выполнение индивидуальных заданий призвано привлечь внимание обучающихся на наиболее сложные, ключевые и дискуссионные аспекты изучаемой темы, помочь систематизировать и лучше усвоить пройденный материал.

Индивидуальные задания содержат также тесты, которые могут быть использованы как для проверки знаний обучающихся преподавателем в ходе проведения промежуточной аттестации на семинарских занятиях, а также для самопроверки знаний обучающимися.

Для каждой темы разработан необходимый набор тестовых заданий, в которых сконцентрирована значительная учебная информация, имеющая немаловажное познавательное значение. Тестирование позволяет преподавателю не только оценить успеваемость обучающихся на любом этапе их обучения, но и оказать помощь самим студентам в изучении курса. При проведении самотестирования обучающиеся могут выявить тот круг вопросов, который усвоили слабо, и в дальнейшем обратить на них особое внимание.

Контроль самостоятельной работы обучающихся по выполнению тестовых и иных домашних заданий осуществляется преподавателем с помощью выборочной и фронтальной проверок письменных и устных индивидуальных заданий на семинарских занятиях.

Подготовка к контрольным работам (диктантам, тестам) по основным терминам и понятиям курса.

Промежуточный контроль знаний по основным терминам и понятиям изучаемой дисциплины осуществляется на семинарских занятиях. При подготовке к аудиторным самостоятельным и контрольным работам, обучающимся необходимо повторить пройденный материал и более внимательно сосредоточиться на усвоении терминологии курса.

Обучающийся получает допуск к экзамену при успешном выполнении всех видов учебных занятий.

Преподавание дисциплины предусматривает:

- лекции
- практические занятия
- лабораторные занятия
- устный опрос
- тестирование
- самостоятельную работу (изучение теоретического материала; подготовка к практическим занятиям; выполнение домашних заданий, в т.ч. рефераты, доклады, эссе; курсовое проектирование, индивидуальные расчеты по методическим указаниям к изучению дисциплины, подготовка к контрольным работам, устным опросам, зачетам и экзаменам и пр.)
- контрольные работы
- консультации преподавателя.

Лекции по дисциплине читаются как в традиционной форме, так и с использованием активных форм обучения.

Главной задачей каждой лекции является раскрытие сущности темы и анализ ее главных положений. Рекомендуется на первой лекции довести до внимания студентов структуру курса и его разделы, а также рекомендуемую литературу. В дальнейшем указывать начало каждого раздела, суть и его задачи, а, закончив изложение, подводить итог по этому разделу, чтобы связать его со следующим.

Содержание лекций определяется рабочей программой курса. Каждая лекция должна охватывать определенную тему курса и представлять собой логически вполне законченную работу. Лучше сократить тему, но не допускать перерыва ее в таком месте, когда основная идея еще полностью не раскрыта.

Для максимального усвоения дисциплины рекомендуется изложение лекционного материала с элементами обсуждения. Лекционный материал должен быть снабжен конкретными примерами.

Целями проведения практических и лабораторных занятий являются:

- установление связей теории с практикой в форме экспериментального подтверждения положений теории;
- развитие логического мышления;
- умение выбирать оптимальный метод решения;
- обучение обучающихся умению анализировать полученные результаты;
- контроль самостоятельной работы обучающихся по освоению курса.

Каждое практическое занятие целесообразно начинать с повторения теоретического материала, который будет использован на нем. Для этого очень важно четко сформулировать цель занятия и основные знания, умения и навыки, которые студент должен приобрести в течение занятия.

На практических и лабораторных занятиях преподаватель принимает решенные и оформленные надлежащим образом задания, должен проверить правильность решения задач, оценить глубину знаний данного теоретического материала, умение анализировать и решать поставленные задачи, выбирать эффективный способ решения, умение делать выводы.

Пакет заданий для самостоятельной работы рекомендуется выдавать в начале семестра, определив предельные сроки их выполнения и сдачи. Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации обучающегося (при сдаче зачета, экзамена).

Задания для самостоятельной работы составляются, как правило, по темам и вопросам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).

Образовательный портал Орловского ГАУ на платформе eLearning Server 4G, разработчик Hypermethod.

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю).

Специализированная лаборатория, имеющая следующее оборудование: бактерицидный облучатель, денси-ла-метр, ламинарный бокс, микроскоп, СО₂-инкубатор, стерилизатор воздушный, стерилизатор паровой (автоклав), сухожаровый шкаф, термостат, УФ-облучатель, лабораторная микроцентрифуга, лабораторный бокс, центрифуга, шейкер-термостат, ферментеры, спектрофотометр, аквадистиллятор, автопипетки, анализатор влажности, весы аналитические, лиофильная сушка, планшетный фотометр, рефрактометр, роторный испаритель, водяная баня.

12. Критерии оценки знаний обучающихся

В соответствии с модульным принципом обучения весь учебный материал дисциплины делится на завершённые блоки – модули: направления в защите растений; методы оздоровления растений.

Безупречное усвоение обучающимся модуля учебной дисциплины оценивается в 100 рейтинговых баллов («100% успеха»). График выполнения устанавливается в зависимости от календарного плана. Преподаватель кафедры, ведущий занятия со студенческой группой, обязан проинформировать об этом группу на первом занятии в семестре.

Максимальная сумма рейтинговых баллов по учебной дисциплине по результатам промежуточных этапов контроля в семестре составляет 60.

Неявка обучающегося на промежуточный контроль в установленный срок оценивается нулевым баллом. Дополнительные 2-3 дня для отчетности по пропущенным контрольным точкам устанавливаются преподавателем или заведующим соответствующей кафедрой в конце каждого месяца семестра.

Обучающийся, набравший в семестре сумму баллов меньше указанной, но не менее 20 баллов, может «добрать» недостающие баллы в течение последней недели семестра перед началом экзаменационной сессии. Опрос, как правило, проводится преподавателем, проводившим в семестре занятия с обучающимися данной учебной группы. В течение последней недели семестра заведующий кафедрой обязан обеспечить работу учебных лабораторий и предоставить возможность обучающимся, имеющим задолженность по лабораторному практикуму, ликвидировать ее.

Для обучающихся, показавших в течение семестра высокие результаты в изучении учебной дисциплины, устанавливаются поощрения. Обучающийся, набравший по курсу на промежуточных этапах сумму от 55 до 60 баллов, имеет право получить зачет без дополнительного опроса.

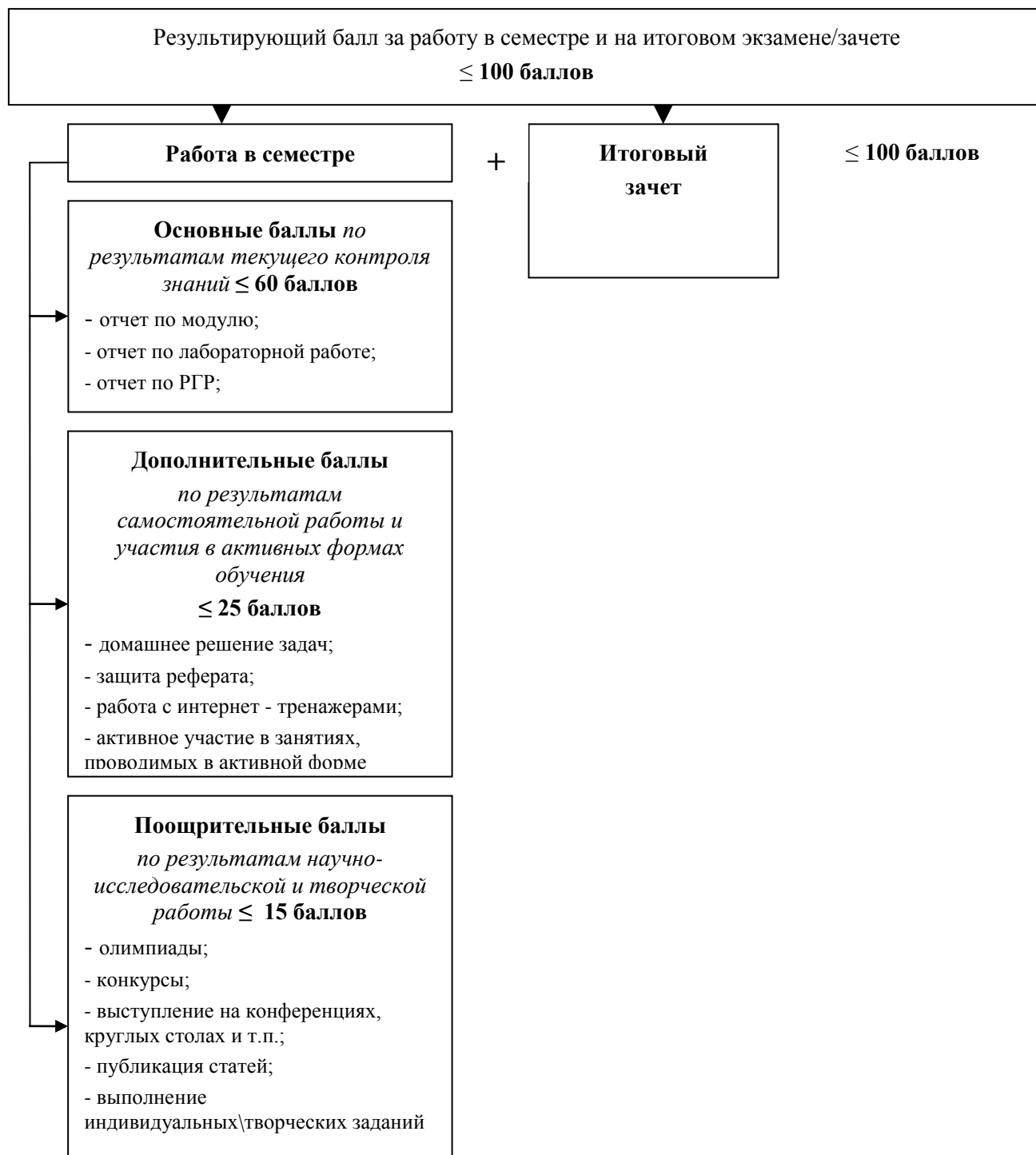
По результатам аудиторной и самостоятельной работы, отчетов по темам модулей обучающийся набирает определенное количество баллов. Распределение баллов в семестре приведено в схеме 1 «Распределение баллов в семестре».

В таблице 8 представлена шкала пересчёта баллов в соответствующую академическую оценку.

Таблица 8 - Шкала интервальных баллов, соответствующая итоговой оценке

Балльная оценка	от 0 до 54	от 55 до 69	от 70 до 84	от 85 до 100
Академическая оценка	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
Зачет	Не зачтено	Зачтено		

Схема 1 - РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БАЛЛОВ В СЕМЕСТРЕ



**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОРЛОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.В. ПАРАХИНА»**

Фонд оценочных средств

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Направление подготовки – 19.04.01 – **БИОТЕХНОЛОГИЯ**

Направленность – **БИОТЕХНОЛОГИЯ**

Квалификация – **МАГИСТР**

1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы дисциплины «Молекулярное моделирование»

Код контролируемой компетенции (или ее части) и ее формулировка	Контролируемые разделы (темы) дисциплины (результаты по разделам)	Уровни освоения дисциплины	Наименование оценочного средства	
			Текущий контроль	Промежуточная аттестация
ПК-14 – способность использовать типовые и разрабатывать новые методы инженерных расчетов технологических параметров и оборудования биотехнологических производств	1. теоретические основы молекулярного моделирования; 2. экспериментально-компьютерное моделирование молекулярных объектов	Пороговый	Вопросы для самопроверки, отчет по практикумам	Вопросы к зачету
		Повышенный	Тест, защита реферата	
		Высокий	Задания для самостоятельной работы студентов, выполнение индивидуальных творческих заданий	

2 Описание показателей и критериев оценивания уровня приобретенных компетенций на различных этапах их формирования

Код контролируемой компетенции	Критерии в соответствии с уровнем освоения ООП			Технологии формирования
	Пороговый (базовый) (зачтено) 55-69 баллов	Повышенный (зачтено) 70-84 балла	Высокий (зачтено) 85-10 баллов	
ПК-14	<i>Знает</i> основные термины и принципы использования методов инженерных расчетов технологических параметров и оборудования в создании нано-био-структур	<i>Знает</i> основные термины и принципы использования методов инженерных расчетов технологических параметров и оборудования в создании нано-био-структур	<i>Знает</i> основные термины и принципы использования методов инженерных расчетов технологических параметров и оборудования в создании нано-био-структур	Лекции и практические занятия с использованием активных и интерактивных приемов обучения. Самостоятельная работа.
	<i>Умеет</i> использовать стандартные виды процедур для сбора конкретной информации по применению биотехнологии в создании нано-био-структур	<i>Умеет</i> использовать стандартные виды процедур для сбора конкретной информации по применению биотехнологии в создании нано-био-структур. <i>Умеет</i> качественно определять качество нано-био-структур	<i>Умеет</i> использовать стандартные виды процедур для сбора конкретной информации по применению биотехнологии в создании нано-био-структур. <i>Умеет</i> качественно определять качество нано-био-структур	Лекции и практические занятия с использованием активных и интерактивных приемов обучения. Самостоятельная работа.
	<i>Владеет</i> основами обработки данных, необходимых для решения экспериментальных задач в области сельскохозяйственной биотехнологии.	<i>Владеет</i> основами обработки данных, необходимых для решения экспериментальных задач в области сельскохозяйственной биотехнологии.. <i>В</i> любых стандартных профессиональных ситуациях.	<i>Владеет</i> основами обработки данных, необходимых для решения экспериментальных задач в области молекулярной биотехнологии. <i>Владеет</i> современными методами производства БАВ из растительного и животного сырья.	Лекции и практические занятия с использованием активных и интерактивных приемов обучения. Самостоятельная работа.

3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе образовательной программы и шкалы их оценивания

Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОРЛОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.В. ПАРАХИНА»**

Кафедра биотехнологии

**Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы
по дисциплине «Молекулярное моделирование»**

Тема 1. Теоретические основы молекулярного моделирования

1. Понятие о методах моделирования и моделях. Виды моделей. Цели моделирования.
2. Что вы знаете об истории изучения структуры макромолекул и их динамики в растворах? Когда были проведены пионерские работы в этой области?
3. Дайте определение конфигурации и конформации макромолекулы. Чем они отличаются? Какими методами (экспериментальными, теоретическими) они изучаются?
4. Какие макромолекулы относятся к жесткоцепным? Их характерные свойства и отличия от гибких цепей. Назовите модели жёстких и полужёстких цепей. Следует ли понимать жёсткость как полное отсутствие конформаций? Чем характеризуется жёсткость? Что такое персистентная длина и как она оценивается? Белки как важнейшие природные полимеры. Какова их химическая характеристика? Сколько уровней имеет структура молекул белков (первичная, вторичная, третичная, четвертичная)? Какова связь этой структуры со свойствами белковых систем?
5. Охарактеризуйте решёточные модели макромолекул. Когда появилась теория Флори—Хаггинса? Какие свойства полимерных систем она объясняет? Сколько приближений насчитывает эта теория? Кратко расскажите обо всех трёх.
6. В чём суть и специфика методов Монте-Карло? Как они применяются для моделирования состава макромолекул при сополимеризации?
7. Метод Монте-Карло и его статистическое обоснование. Решёточные и континуальные методы Монте-Карло.
8. Периодические граничные условия. Функциональный вид и физическая природа потенциалов молекулярного взаимодействия. Невалентные взаимодействия: ван-дер-ваальсовы и кулоновские силы. Радиус обрезания. Комбинационные правила.
9. На каком основании методы Монте-Карло применяются для моделирования конформационных превращений? Расскажите о методе Метрополиса. Почему он настолько эффективен?

Тема 2. Экспериментально-компьютерное моделирование молекулярных объектов

10. В чём состоит метод молекулярной механики? Его особенности и сильные стороны. Что такое конформационный анализ? Каким образом минимизируется потенциальная энергия в этом методе? Назовите основные алгоритмы.
11. Чем характеризуется метод молекулярной динамики? Какие уравнения в нём применяются, как они интегрируются? Каким образом рассчитываются молекулярные величины из траектории движения макромолекулы? Методы расчёта структурных и динамических характеристик молекулярных систем по данным имитационного моделирования.

12. Пространственные и временные масштабы. Единицы измерения в «молекулярном мире». Характерные единицы массы, энергии, времени. О числе частиц в моделируемой молекулярной системе. Эффективный учёт растворителя.

13. Периодические граничные условия. Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий. Оценка числа невалентных взаимодействий. Эффективные алгоритмы, использующие конечный радиус взаимодействия.

14. Алгоритм Верле, или метод составления списков. Оценка его быстродействия. Гибкий алгоритм оценки для пересчёта списков. Метод сканирования по пространству (присоединённые списки). Линейная зависимость трудоёмкости вычислений от числа частиц. Численное интегрирование уравнений движения. Алгоритм Верле (простейшая разностная аппроксимация).

15. Алгоритм с перескоками (leap-frog алгоритм). Скоростной алгоритм Верле. Учёт влияния внешней среды. Термостаты. Температура. Мгновенная температура. Уравнения движения молекулярной системы, учитывающие наличие термостата.

16. Изотермическая молекулярная динамика (метод масштабирования). Термостаты Берендсена и Нозе-Гувера. Стохастическое воздействие окружающей среды. Броуновская динамика. Столкновительная молекулярная динамика.

17. Варианты моделирования систем методами квантовой химии и квантово-механическими методами. Гибридные методы моделирования молекулярных систем.

18. Охарактеризуйте программы и комплексы программ, с которыми вы работали (MoDyр, DockSearch, SPARTAN, Alchemy 2000, NAMD, VMD, GROMACS, HyperChem). В чём их общность, в чём отличия? Каковы сильные и слабые стороны каждой программы, область применимости? Какими вам видятся современные проблемы и перспективы молекулярной динамики?

Критерии оценки:

«зачтено» выставляется, если обучающийся полностью владеет знаниями и умениями в области современных биотехнологий нано-био-структур, способен понимать и интерпретировать информацию, обоснованно формулировать актуальность, новизну и практическую значимость использования современных биотехнологий в сельскохозяйственном производстве; делать логические выводы и иметь собственную точку зрения по обсуждаемому вопросу;

«не зачтено» выставляется, если обучающийся не полностью владеет знаниями и умениями в области современных биотехнологий нано-био-структур, способен понимать и интерпретировать информацию, обоснованно формулировать актуальность, новизну и практическую значимость использования современных биотехнологий в сельскохозяйственном производстве; делать логические выводы и иметь собственную точку зрения по обсуждаемому вопросу.

Составитель: к.т.н., доцент

И.А. Гнеушева

«____» _____ 2018

Оценочные средства для текущего контроля

**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ОРЛОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.В. ПАРАХИНА»**

Кафедра биотехнологии

Комплект заданий для контрольной работы

Тема 1. Теоретические основы молекулярного моделирования

(в форме устного опроса)

- Модель Рауза и ее обобщения.
- Конформационная динамика.
- Модели конформационной динамики.
- Ограниченная диффузия.
- Особенности эффекта Мессбауэра для систем с конформационной подвижностью.
- Релаксация и фолдинг полимерной цепи в вязкой среде.
- Скорость диссипации энергии при конформационной релаксации.
- Представления о теории фолдинга биополимеров.
- Энергетическая воронка.
- Кинетика фолдинга.

Тема 2. Экспериментально-компьютерное моделирование молекулярных объектов (круглый стол)

- Алгоритмы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений.
- Алгоритм Верле.
- Канонический и микроканонический ансамбли.
- Алгоритмы поддержания постоянной температуры и давления.
- Нефизические эффекты при использовании некоторых алгоритмов термостатирования и баростатирования.
- Протоколы молекулярной динамики.
- Проблема эргодичности траекторий.
- Представление результатов расчетов траекторий молекулярной динамики

Критерии оценки (в баллах):

- 15 баллов выставляется обучающемуся, если он полностью раскрыл вопросы контрольной работы, дал определения основных понятий, привел конкретные примеры;
- 10 баллов выставляется обучающемуся, если он частично раскрыл вопросы контрольной работы, дал определения основных понятий, привел конкретные примеры;
- 5 баллов выставляется обучающемуся, если тематика раскрыта не полностью, даны не все определения.

Составитель: К.Т.Н., доцент

И.А. Гнеушева

«_____» _____ 2018

4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Дисциплина «Молекулярное моделирование»

Основным критерием оценки знаний является способность обучающегося самостоятельно работать с изучаемыми методами, применять их практически, в том числе свободно владеть компьютером и прикладными программами, уметь интерпретировать и анализировать полученные результаты. Дополнительным критерием является четкость и глубина понимания методов, в их практическом применении. Важным критерием также является способность самостоятельно разбираться в современной литературе **по современным вопросам создания биологических средств**, в том числе в зарубежной литературе.

В процессе обучения обучающийся должен выполнить **4 лабораторных работ, индивидуальное домашнее задание, а также в виде реферата с представлением презентации по темам: «Современная биотехнология в создании нано-био-структур».**

Промежуточная аттестация обучающегося проводится по результатам проверки **на зачете** уровня освоения дисциплины. Зачет проводится либо устно (по теоретическим и практическим вопросам). Кроме того, по спорным вопросам проводится собеседование с преподавателем.

На зачете от обучающегося требуется ответить на вопросы состоящие из двух частей – теоретической («на знание») и практической («на умение»). Если такое деление не содержится в самой формулировке вопроса, то всегда подразумевается: обучающийся должен быть готов проиллюстрировать на конкретном примере теоретическое положение, знание которого он хочет продемонстрировать. Таким образом, любой ответ должен в обязательном порядке содержать две составляющие: а) формулировки определений понятий и теоретических посылок; б) фактические примеры, иллюстрирующие проводимые положения.

Написание и представление письменной работы (реферат, индивидуальная домашняя работа) не является полным основанием для вынесения оценки, хотя может учитываться преподавателем. В любом случае обучающийся должен продемонстрировать глубокое знание вопроса, изложенного в письменной работе, и быть готовым поддержать дискуссию с преподавателем по теме работы.

Обучающийся должен продемонстрировать уверенное владение лексическим аппаратом данной дисциплины – дать ясное и точное определение всех использованных в ответе терминов и понятий, привести примеры использования.

Основным методом оценки знаний обучающихся является применяемая во время обучения бально-рейтинговая система. Учебный материал разделяется на логически завершённые части (модули), после изучения которого предусматривается аттестация **в форме защиты контрольной работы**. Каждый модуль включает обязательные виды работ – лекционные и практические занятия, домашние самостоятельные работы. Качество работы обучающихся оценивается в рейтинговой системе в баллах, оценка является накопительной (сумма баллов дает рейтинг каждого обучающегося) и используется для структурирования системной работы студентов в течение всего периода обучения.

Перечень учебных заданий и их бальная оценка

Качество полученных обучающимся знаний осуществляется с применением дифференцированной балльной оценки. Максимально за работу в семестре обучающийся может набрать 100 баллов.

При этом действует следующая дифференцированная шкала балльной оценки:

Типовая балльная оценка	0-54	55-69	70-84	85-100
Зачет	Не зачтено	зачтено	зачтено	зачтено

Перечень видов аттестации

Основные баллы (до 60 баллов):

- посещение лекционных и практических занятий – до +7 баллов;
- выполнение заданий на практических занятиях – до +21 балла;
- выполнение итоговой контрольной работы по модулю (контрольного задания), текущее тестировании знаний – до +32 баллов.

Дополнительные баллы (до 25 баллов):

- домашнее решение задач (выполнение домашней контрольной работы или индивидуальной работы) – до +18 баллов;
- написание и защит реферата, доклада, сообщений – до +2 баллов;
- активное участие в занятиях, проводимых в активной форме – до +3 баллов;
- работа с интернет-тренажером = до +2 баллов.

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

[illegible]