

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«06» октября 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Современные методы компьютерного моделирования нанопористых
материалов**

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Коллоидная химия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №8 от 04.10.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-3.С. Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области коллоидной химии.	СПК-3.С.1 Грамотно обрабатывает результаты эксперимента в области коллоидной химии с использованием современной вычислительной техники.	Знать: теоретические основы наиболее распространенных методов компьютерного моделирования нанопористых материалов Уметь: обоснованно выбирать метод моделирования, интерпретировать полученные результаты в рамках выбранного приближения Владеть: навыками прикладного программирования в рамках вычислительных пакетов для моделирования нанопористых материалов

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

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов занятия семинарского типа, 4 часа – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основы основы коллоидной, физической и квантовой химии

Уметь: формулировать задачи в рамках парадигмы “структура-свойство” применительно к нанопористым материалам

Владеть: базовыми навыками программирования (в рамках университетского курса)

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы	Самостоятельная работа обучающегося, часы

форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		из них					из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Обзор ключевых подклассов нанопористых материалов. Концепция "nanoporous materials genome".	6	2	2				4	2		2
Тема 2. Атомистическое моделирование нанопористых материалов. Молекулярная динамика и метод Монте-Карло.	8	2	2				4	4		4
Тема 3. Моделирование электронной структуры нанопористых материалов.	9	2	2		1		5	4		4
Тема 4. Машинное обучение с учителем. Классические методы и искусственные нейронные сети.	9	2	2		1		5	4		4
Тема 5. Методы представления кристаллической структуры твердых тел в задачах анализа данных.	12	3	3		1	1	8	4		4

Тема 6. Применение методов машинного обучения для прогнозирования адсорбционных, механических, электронных, каталитических свойств нанопористых материалов.	11	3	3		1		7	4		4
Тема 7. Генеративные модели. Обратный дизайн "свойство-структура" нанопористых материалов.	9	2	2			1	5	4		4
Тема 8. Обзор гибридных органо-неорганических гибридных материалов, не входящих в нанопористых материалов геном.	8	2	2				4	4		4
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>										
Итого	72	18	18		4	2	42	30		30

Содержание разделов:

Тема 1. Основы ретикулярной химии. Подклассы нанопористых материалов: цеолиты, металл-органические и ковалентные каркасные структуры, пористые полимерные сетки, молекулярные кристаллы с водородными связями. Практические применения: адсорбенты, катализаторы, химические сенсоры, электронные и ионные проводники. Концепция "nanoporous materials genome", компьютерный дизайн нанопористых материалов. Открытые курируемые базы данных нанопористых материалов.

Тема 2. Основные методы атомистического моделирования нанопористых материалов. Метод молекулярной динамики, метод Монте Карло. Специализированные силовые поля, методы описания нековалентных взаимодействий. Высокоинтенсивный скрининг функциональных нанопористых материалов. Предобработка кристаллических структур. Программные пакеты атомистического моделирования нанопористых материалов.

Тема 3. Теория функционала плотности. Выбор уравнения приближения, квантовохимическая "лестница Иакова". Коррекционные поправки: дисперсионная поправка Гримме, модель Хаббарда. Периодические и кластерные модели представления металл-органических каркас-

ных структур. Метод функционала плотности в приближении сильной связи. Программные пакеты моделирования электронной структуры нанопористых материалов.

Тема 4. Основные задачи машинного обучения с учителем: классификация и регрессия. Наиболее распространенные методы “классического” машинного обучения: метод ближайших соседей, линейные модели, деревья решений и их ансамбли, метод опорных векторов, градиентный бустинг на деревьях решений. Структура полносвязной нейронной сети. Обучение нейронных сетей, метод обратного распространения ошибки. Современные архитектуры нейронных сетей: полносвязные, сверточные, рекуррентные, графовые. Оценка и контроль качества предсказательных моделей. Оптимизация гиперпараметров. Работы с “малыми данными”. Программные пакеты для машинного обучения.

Тема 5. Представление кристаллической структуры нанопористых материалов в виде признакового описания. Основные ограничения и требования, предъявляемые к методу представления. Иерархия представлений, локальные и глобальные методы описания. Распространенные функциональные формы описания локального атомного окружения. Физико-химические дескрипторы. Универсальные фрагментные дескрипторы. Представления, основанные на матрице межатомных расстояний. Устойчивые гомологии, топологические дескрипторы (баркоды) сети пор. “Решеточные” дескрипторы. SMILES-подобное описание структуры металл-органических каркасных соединений. Графовое представление, инкорпорированное в архитектуру графовых нейронных сетей. Отбор и конструирование признаков. Нормализация данных.

Тема 6. Примеры использования моделей машинного обучения для прогнозирования физико-химических свойств нанопористых материалов. Предсказание адсорбционной емкости и селективности разделения газовых смесей. Прогнозирование химической стабильности. Предсказание электронных, механических и каталитических свойств. Прогнозирование оптимальных условий синтеза. Создание специализированных нейросетевых потенциалов межчастичного взаимодействия для металл-органических каркасных структур. Предсказание частичных зарядов на атомах.

Тема 7. Обратная задача “свойство-структура” в химии и материаловедении. Эволюционные алгоритмы. Методы байесовской оптимизации. Генеративные модели: (вариационные) автокодировщики, порождающие состязательные сети. Применение методов машинного обучения для обратного дизайна функциональных нанопористых материалов. Концепция картирования “энергия-структура-свойство”.

Тема 8. Органические, неорганические и гибридные наноклетки (англ. nanocages). Гибридные органо-неорганические (низкоразмерные) перовскиты. Гибридные органо-неорганические слоистые материалы.

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Конспекты лекций, презентации лекций, основная и дополнительная литература.

Вопросы для домашних заданий.

1. Провести классификацию предложенной выборки металл-органических каркасных соединений по типу координационного центра и органического линкера.
2. Рассчитать изотерму адсорбции водорода (метана, углекислого газа) для предложенного металл-органического каркасного соединения с использованием метода Монте-Карло для большого канонического ансамбля.
3. Рассчитать селективность разделения смеси благородных газов (углеводородов) для предложенного металл-органического каркасного соединения с использованием метода Монте-Карло для большого канонического ансамбля.
4. Рассчитать ширину запрещенной зоны предложенного металл-органического каркасного соединения в рамках приближения теории функционала плотности.
5. Провести оптимизацию геометрии предложенного ковалентного каркасного соединения с использованием метода функционала плотности в приближении сильной связи.
6. Провести обучение предсказательной модели для прогнозирования адсорбционной емкости по водороду (метану, углекислому газу). Интерпретировать полученные результаты с помощью метода Шапли.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Конспекты лекций
2. Презентации лекций
3. Yaghi O. M., Kalmutzki M. J., Diercks C. S. Introduction to reticular chemistry // Mol. Front. J. – 2019. – Т. 4.
4. Yip S. Handbook of Materials Modeling: Methods: Theory and Modeling. – Springer International Publishing, 2019.
5. Isayev O., Tropsha A., Curtarolo S. (ed.). Materials Informatics: Methods, Tools, and Applications. – John Wiley & Sons, 2019.

Дополнительная литература

1. Boyd P. G., Lee Y., Smit B. Computational development of the nanoporous materials genome // Nature Reviews Materials. – 2017. – Т. 2. – №. 8. – С. 1-15.
2. Sturluson A. et al. The role of molecular modelling and simulation in the discovery and deployment of metal-organic frameworks for gas storage and separation // Molecular simulation. – 2019. – Т. 45. – №. 14-15. – С. 1082-1121.

3. Jablonka K. M. et al. Big-data science in porous materials: materials genomics and machine learning // Chemical reviews. – 2020. – Т. 120. – №. 16. – С. 8066-8129.
4. Mancuso J. L. et al. Electronic structure modeling of metal–organic frameworks // Chemical Reviews. – 2020. – Т. 120. – №. 16. – С. 8641-8715.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: к.х.н., н.с., Вадим Викторович Королев

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

1. Классификации нанопористых материалов. Nanoporous materials genome.
2. Курируемые открытые базы данных металл-органических и ковалентных каркасных соединений. Предобработка кристаллических структур.
3. Глобальные дескрипторы кристаллических структур.
4. Локальные дескрипторы кристаллических структур.
5. Программные пакеты для атомистического моделирования нанопористых материалов.
6. Программные пакеты для моделирования электронной структуры нанопористых материалов.
7. Архитектуры нейронных сетей.
8. Валидация предсказательных моделей. Метрики качества классификационных и регрессионных моделей.
9. Оптимизация гиперпараметров. Методы работы с "малыми данными".
10. Интерпретируемость предсказательных моделей машинного обучения.
11. Программные пакеты для машинного обучения.
12. Обратный дизайн нанопористых материалов.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)

Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: теоретические основания наиболее распространенных методов компьютерного моделирования нанопористых материалов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Уметь: обоснованно выбирать метод моделирования, интерпретировать полученные результаты в рамках выбранного приближения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: навыками прикладного программирования в рамках вычислительных пакетов для моделирования нанопористых материалов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене