

1.	<b>Field of study</b>	<b>Biophysics</b>
2.	Academic year of entry	2014/2015 (winter term)
3.	Level of qualifications/degree	second-cycle studies
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

**Module:** Modelowanie komputerowe

**Module code:** 0305-2BF-12-03

**1. Number of the ECTS credits:** 3

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
2BF_03_1	Posiada znajomość zaawansowanych metody modelowania w fizyce, chemii i biologii.	KBF_K04 KBF_W03 KBF_W08	4 4 4
2BF_03_2	zna podstawowe relacje matematyczne stosowane w modelowaniu molekularnym	KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06 KBF_W08	4 4 4 4
2BF_03_3	umie zastosować aparat modelowania matematycznego do rozwiązania złożonych problemów z fizyki i biofizyki	KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06 KBF_W08	3 3 3 3
2BF_03_4	potrafi korzystać z wybranych pakietów oprogramowania do analizy struktury molekularnej, białek, leków itp	KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06 KBF_W08	3 3 3 3

**3. Module description**

<b>Description</b>	
--------------------	--

	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Modelowanie deterministyczne za pomocą równań różniczkowych zwyczajnych - przykłady i ich analiza numeryczna</li> <li>2. Modelowanie stochastyczne za pomocą równań różniczkowych Ito - przykłady i ich analiza numeryczna</li> <li>3. Modelowanie za pomocą równań różniczkowych cząstkowych - przykłady i ich analiza numeryczna</li> <li>3.1. Równanie Laplace'a i jego zastosowanie</li> <li>4. Sieci neuronowe w modelowaniu zjawisk biologicznych</li> <li>5. Metody obliczeniowe fizyki molekularnej:             <ol style="list-style-type: none"> <li>5.1. Deterministyczne metody symulacji komputerowych</li> <li>5.2. Modele cząsteczek i potencjały oddziaływań międzymolekularnych.</li> <li>5.3. Układy izolowane molekuł i układy rozciągnięte (periodyczne warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, obcięcie sferyczne, potencjał przesunięty).</li> <li>5.4. Równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokanonicznego, kanonicznego i izobaryczno-izotermicznego..</li> <li>5.5. Wartości średnie i fluktuacje, wielkości termodynamiczne, transformacje między zespołami, funkcje korelacji oraz współczynniki transportu)</li> </ol> </li> <li>6. Stochastyczne metody symulacji komputerowych             <ol style="list-style-type: none"> <li>6.1. Dynamika brownowska</li> <li>6.2. Metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego, izotermiczno-izobaryczna oraz dla wielkiego zespołu kanonicznego).</li> <li>6.3. Podstawy dynamiki molekularnej ab initio</li> </ol> </li> <li>7. Teoria funkcjonału gęstości</li> <li>8. Metoda symulacji Car-Parinella</li> </ol>
<b>Prerequisites</b>	Wiedza z wykładów „Wybrane elementy matematyki wyższej” oraz sprzężonego z tymi zajęciami wykładu ”Matematyczne podstawy modelowania komputerowego”

4. Assessment of the learning outcomes of the module			
code	type	description	learning outcomes of the module
2BF_03_w_1	aktywność i zaliczenie przedmiotu	Samodzielne modelowanie problemów rozwiązywanych w ramach laboratorium. Zaliczenie na podstawie oddanych projektów	2BF_03_1, 2BF_03_2, 2BF_03_3, 2BF_03_4

5. Forms of teaching						
code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
2BF_03_fs_1	laboratory classes	Rozwiązywanie konkretnych zagadnień modelowania komputerowego. Praca zarówno grupowa jak i indywidualna	30	Praca grupowa nad zadaniami projektowymi, praca samodzielna, przygotowanie prezentacji wyników.	30	2BF_03_w_1