

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:** Matematyczne podstawy modelowania komputerowego

**Module code:** 0305-2BF-12-02

**1. Number of the ECTS credits:** 4

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
2BF_02_1	Posiada znajomość zaawansowanych metody modelowania w fizyce, chemii i biologii.	KBF_K01 KBF_K02 KBF_W03 KBF_W08	4 4 4 4
2BF_02_2	zna podstawowe relacje matematyczne stosowane w modelowaniu molekularnym	KBF_K01 KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06 KBF_W08	4 4 4 4 4
2BF_02_3	umie zastosować aparat modelowania matematycznego do rozwiązywania złożonych problemów z fizyki i biofizyki	KBF_K01 KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06 KBF_W08	3 3 3 3 3
2BF_02_4	potrafi korzystać z wybranych pakietów oprogramowania do analizy struktury molekularnej, białek, leków itp	KBF_K01 KBF_K02 KBF_U02 KBF_U06	3 3 3 3

		KBF_W08	3
--	--	---------	---

### 3. Module description

<b>Description</b>	<p>Wykład sprzężony z Modelowaniem komputerowym - laboratorium</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Równania różniczkowe zwyczajne - przykłady i ich analiza numeryczna             <ol style="list-style-type: none"> <li>1.1. Równanie Laplace'a i jego zastosowanie</li> <li>1.2. Sieci neuronowe w modelowaniu zjawisk biologicznych</li> </ol> </li> <li>2. Metody obliczeniowe fizyki molekularnej:             <ol style="list-style-type: none"> <li>2.1. Równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokanonicznego, kanonicznego i izobaryczno-izotermicznego..</li> <li>2.2. Wartości średnie i fluktuacje, wielkości termodynamiczne, transformacje między zespołami, funkcje korelacji oraz współczynniki transportu)</li> </ol> </li> <li>3. Stochastyczne metody symulacji komputerowych             <ol style="list-style-type: none"> <li>3.1. Dynamika brownowska</li> <li>3.2. Metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego, izotermiczno-izobaryczna oraz dla wielkiego zespołu kanonicznego).</li> </ol> </li> <li>4. Podstawy dynamiki molekularnej ab initio             <ol style="list-style-type: none"> <li>4.1. Teoria funkcjonału gęstości</li> <li>4.2. Metoda symulacji Car-Parinella</li> </ol> </li> </ol>
<b>Prerequisites</b>	Wiedza z wykładów „Wybrane elementy matematyki wyższej” (I stopień studiów)

### 4. Assessment of the learning outcomes of the module

code	type	description	learning outcomes of the module
2BF_02_w_1	egzamin pisemny ( lub egzamin ustny)	Egzamin z wiedzy z zakresu wykładu	2BF_02_1, 2BF_02_2, 2BF_02_3, 2BF_02_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_02_fs_1	lecture	wykład wybranych zagadnień wykorzystaniem pomocy audiowizualnych oraz materiałów interaktywnych	45	lektura uzupełniająca, praca z podręcznikiem, praca z materiałami interaktywnymi	30	2BF_02_w_1