

1.	<b>Nazwa kierunku</b>	<b>biofizyka</b>
2.	Cykl rozpoczęcia	2015/2016 (semestr zimowy), 2016/2017 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

**Moduł kształcenia:** Modelowanie komputerowe

**Kod modułu:** 0305-2BF-12-03

1. Liczba punktów ECTS: 3

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
2BF_03_1	Posiada znajomość zaawansowanych metody modelowania w fizyce, chemii i biologii.	KBF_K04	4
		KBF_W03	4
		KBF_W08	4
2BF_03_2	zna podstawowe relacje matematyczne stosowane w modelowaniu molekularnym	KBF_K02	4
		KBF_U02	4
		KBF_U06	4
		KBF_W08	4
2BF_03_3	umie zastosować aparat modelowania matematycznego do rozwiązania złożonych problemów z fizyki i biofizyki	KBF_K02	3
		KBF_U02	3
		KBF_U06	3
		KBF_W08	3
2BF_03_4	potrafi korzystać z wybranych pakietów oprogramowania do analizy struktury molekularnej, białek, leków itp	KBF_K02	3
		KBF_U02	3
		KBF_U06	3
		KBF_W08	3

3. Opis modułu

Opis	
------	--

	<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>Wymagania wstępne</b>	Wiedza z wykładów „Wybrane elementy matematyki wyższej” oraz sprzężonego z tymi zajęciami wykładu ”Matematyczne podstawy modelowania komputerowego”

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
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. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
2BF_03_fs_1	laboratorium	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