

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Cykl rozpoczęcia	2017/2018 (semestr zimowy), 2018/2019 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Matematyczne podstawy modelowania komputerowego

Kod modułu: 0305-2BF-17-02

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 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. Opis modułu	
Opis	Wykład sprzężony z Modelowaniem komputerowym - laboratorium 1. Równania różniczkowe zwyczajne - przykłady i ich analiza numeryczna 1.1. Równanie Laplace'a i jego zastosowanie 1.2. Sieci neuronowe w modelowaniu zjawisk biologicznych 2. Metody obliczeniowe fizyki molekularnej: 2.1. Równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokanonicznego, kanonicznego i izobaryczno-izotermicznego.. 2.2. Wartości średnie i fluktuacje, wielkości termodynamiczne, transformacje między zespołami, funkcje korelacji oraz współczynniki transportu) 3. Stochastyczne metody symulacji komputerowych 3.1. Dynamika brownowska 3.2. Metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego, izotermiczno-izobaryczna oraz dla wielkiego zespołu kanonicznego). 4. Podstawy dynamiki molekularnej ab initio 4.1. Teoria funkcjonału gęstości 4.2. Metoda symulacji Car-Parinella
Wymagania wstępne	Wiedza z wykładów „Wybrane elementy matematyki wyższej” (I stopień studiów)

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
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. 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_02_fs_1	wykład	wykład wybranych zagadnień wykorzystaniem pomocy audiowizualnych oraz materiałów interaktywnych	45	lektura uzupełniająca, praca z podręcznikiem, praca z materiałami interaktywnymi	45	2BF_02_w_1