

SYLABUS ZAJĘĆ/GRUPY ZAJĘĆ

Dane ogólne

Jednostka organizacyjna	Wydział Politechniczny		
Kierunek studiów	Technologia chemiczna		
Nazwa zajęć / grupy zajęć	Zastosowanie symulacji dynamiki molekularnej w technologii i inżynierii chemicznej		
Course / group of courses	Application of molecular dynamics simulation in chemical technology and engineering		
Kod zajęć / grupy zajęć		Kod Erasmusa	
Punkty ECTS	1	Rodzaj zajęć¹	Do wyboru
Rok studiów		Semestr	
Forma prowadzenia zajęć²	Liczba godzin [godz.]	Punkty ECTS	Semestr
ćwiczenia projektowe	15	1	
			Forma zaliczenia
			Zaliczenie z oceną
Koordinator	Dr hab. Rafał Kurczab		
Prowadzący	Dr hab. Rafał Kurczab		
Język wykładowy	Polski		

Objaśnienia:

¹ Rodzaj zajęć: obowiązkowe, do wyboru.

² Forma prowadzenia zajęć: W - wykład, Ć - ćwiczenia audytoryjne, L - lektorat, S - seminarium/ zajęcia seminaryjne, ĆP - ćwiczenia praktyczne (w tym zajęcia wychowania fizycznego), ĆS - ćwiczenia specjalistyczne (medyczne/ kliniczne), LO - ćwiczenia laboratoryjne, LI - laboratorium informatyczne, ZTI - zajęcia z technologii informacyjnych, P - ćwiczenia projektowe, ZT - zajęcia terenowe, SK - samokształcenie (i inne), PR - praktyka

Dane merytoryczne

Wymagania wstępne			
Znajomość podstaw matematyki, fizyki, informatyki, a także znajomość metod chemii analitycznej.			
Szczegółowe efekty uczenia się			
Lp.	Student, który zaliczył zajęcia zna i rozumie/ potrafi/ jest gotów do:	Kod efektu dla kierunku studiów	Sposób weryfikacji efektu uczenia się
1	zna oraz potrafi posługiwać się podstawowym oprogramowaniem do symulacji dynamiką molekularną	TCH2_U01	Wykonanie zadania
2	potrafi wykonać obliczenia na kartach graficznych GPU,	TCH2_U01	Wykonanie zadania
3	potrafi samodzielnie wykonać analizę otrzymanych trajektorii i wyciągnąć na jej podstawie właściwe wnioski o ewolucji czasowej układu i korelacji z wielkościami makroskopowymi	TCH2_U04	Wykonanie zadania
4	potrafi przygotowywać rzetelny raport z wykonanych ćwiczeń laboratoryjnych	TCH2_U10	Wykonanie zadania

Stosowane metody osiągania zakładanych efektów uczenia się (metody dydaktyczne)

Laboratorium: praca na komputerach wyposażonych w specjalistyczne oprogramowanie do symulacji dużych układów molekularnych metodą dynamiki molekularnej (np. NAMD, GROMACS).

Kryteria oceny i weryfikacji efektów uczenia się

Laboratorium: mini-projekt do samodzielnego wykonania z użyciem poznanych narzędzi.

Warunki zaliczenia

Laboratorium - zaliczenie końcowego mini-projektu.
Treści programowe (skrótowy opis)
Poznanie podstawowych narzędzi i oprogramowania do wykonywania symulacji dużych układów molekularnych metodami dynamiki molekularnej. Poznanie procedur ultraszybkich obliczeń za pomocą kart graficznych (z procesorami CUDA).
Contents of the study programme (short version)
Basic tools and software for simulating large molecular systems by molecular dynamics methods. Understanding the procedures of ultra-fast calculations with the use of graphic cards (with CUDA processors).
Treści programowe (pełny opis)
Wstęp teoretyczny do dynamiki molekularnej. Zapoznanie z podstawowymi parametrami używanymi w trakcie symulacji. Poznanie podstawowych funkcji programów do tworzenia plików startowych z geometriami badanych układów molekularnych (VMD), uruchamianie symulacji (NAMD/GROMACS), analiza trajektorii układu oraz korelacja z danymi eksperymentalnymi. Poznanie technologii wysokowydajnych obliczeń dynamiką molekularną z użyciem kart graficznych GPU (procesory CUDA). Zastosowanie poznanej wiedzy i umiejętności w realizacji mini-projektów związanych z użyciem techniki symulacji dynamiki molekularnej w zagadnieniach inżynierii i technologii chemicznej (np. badanie adsorpcji gazów na różnych powierzchniach, badanie procesów tworzenia i dynamiki miceli w roztworach wodnych, badanie reakcji biochemicznych zachodzących w miejscach katalitycznych wybranych enzymów).
Literatura (do 3 pozycji dla formy zajęć – zalecane)
<ol style="list-style-type: none"> Keil F., Mackens W., Voß H., Werther J. (Eds.), Scientific Computing in Chemical Engineering, Springer, 1999, Garcia D., Green P.J. (Eds.), Molecular Dynamics: Theory, Kinetics and Implementation (Chemical Engineering Methods and Technology: Computer Science, Technology and Applications), Nova Novinka; UK ed. edition (July 1, 2012)

Dane jakościowe

Przyporządkowanie zajęć/grupy zajęć do dyscypliny naukowej/artystycznej	Inżynieria chemiczna
Sposób określenia liczby punktów ECTS	
Forma nakładu pracy studenta (udział w zajęciach, aktywność, przygotowanie sprawozdania, itp.)	Obciążenie studenta [w godz.]
Bezpośredni kontakt z nauczycielem: udział w zajęciach – laboratorium (15 h) + konsultacje z prowadzącym (3 h) + udział w zaliczeniu (2 h)	20
Przygotowanie do laboratorium, ćwiczeń, zajęć:	4
Przygotowanie do kolokwium i egzaminu	4
Indywidualna praca własna studenta z literaturą, wykładami itp.	2
Inne	
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	30
Liczba punktów ECTS	
Zajęcia wymagające bezpośredniego udziału nauczyciela akademickiego (20 h)	0,7
Zajęcia o charakterze praktycznym (30 h)	1