

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Facultatea de Fizică
1.3 Departamentul	Școala Doctorală de Fizică
1.4 Domeniul de studii	Fizică
1.5 Ciclu de studii	Doctorat
1.6 Programul de studiu	Fizică

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Modele teoretice și metode de simulare în fizică						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof.dr. Titus Beu, Prof.dr. Vasile Chiș, Prof.dr. Ladislau Nagy, Prof.dr. Zoltan Neda, Conf.dr. Zoltan Balint						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof.dr. Titus Beu, Prof.dr. Vasile Chiș, Prof.dr. Ladislau Nagy, Prof.dr. Zoltan Neda, Conf.dr. Zoltan Balint						
2.4 Titularul activităților de laborator							
2.5 Anul de studiu	I	2.6 Semestrul	I	2.7 Tipul de evaluare	Evaluare continuă	2.8 Regimul disciplinei	DO

3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	3	Din care:					
3.2 curs	2	3.3 seminar	1	3.4 laborator	0		
3.5 Total ore din planul de învățământ	42	Din care:					
3.6 curs	28	3.7 seminar	14	3.8 laborator	0		
Distribuția fondului de timp:							ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe							42
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren							14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri							22
Tutoriat							20
Examinări							10
Alte activități:							-
3.9 Total ore studiu individual	108						
3.10 Total ore pe semestru	150						
3.11 Numărul de credite	10						

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	mecanică cuantică, fizică statistică, fizica atomului, fizica moleculei, metode numerice, analiză, algebră, cunoștințe de teoria probabilităților
4.2 de competențe	- abilități de calcul analitic - abilități de programare în Python, C/C++, Mathematica - abilități de utilizare a unor medii de programare și aplicații grafice

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, computer, soft dedicat
5.2 de desfășurare a seminarului	Sală adecvată, tablă, videoproiector, rețea de calculatoare, acces internet, soft dedicat Termenul predării lucrărilor de seminar (referate, proiecte) este stabilit de titular de comun acord cu studenții. Nu se vor accepta cererile de amânare a acestuia pe motive altfel decât obiectiv întemeiate.
5.3 de desfășurare a laboratorului	nu este cazul

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none">- Însușirea de concepte și modele avansate de dinamică moleculară.- Abilități de construire a modelelor moleculare și pregătire a datelor de intrare pentru coduri numerice avansate.- Capacitatea de selectare a modelelor și opțiunilor adecvate pentru simulări complexe.- Folosirea corectă a metodelor de chimie cuantică și a modelelor adecvate pentru calculul proprietăților moleculare- Capacitatea de a rezolva ecuația lui Schrodinger pentru interacțiunea atom-câmp extern prin aplicarea diverselor metode numerice- Corelarea datelor teoretice și computaționale cu cele experimentale- Comunicarea ideilor științifice complexe, a concluziilor experimentelor sau a rezultatelor unui proiect științific.- Capacitatea de a obține și de a susține argumentat rezultatele științifice; capacitatea de a elabora lucrări științifice.- Utilizarea metodelor și modelelor științifice în domenii restrânse sau interdisciplinare.- Capacitate avansată de planificare și organizare.- Operarea cu principiile de prelucrare a datelor tip imagine digitală. Capacitatea de analiză și sinteză a datelor; capacitatea de a modela efectul factorilor externi asupra imaginilor.- Utilizarea și adaptarea de pachete software pentru analiza și prelucrarea datelor. Utilizarea de sisteme informatice automate de prelucrare și extragere a datelor din imagini digitale 2D și respectiv, 3D.- Efectuarea unor experimente de prelucrare a datelor și evaluarea rezultatelor acestora pe baza modelelor teoretice existente. Mod de gândire multi- și interdisciplinar.
--------------------------------	---

Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> - Competențe de modelare și analiză, inclusiv în context interdisciplinar. - Competențe de utilizare a tehnicii de calcul de înaltă performanță. - Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil, cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului. - Aplicarea, în contextul respectării legislației, a drepturilor de proprietate intelectuală (inclusiv transfer tehnologic), a metodologiei de certificare a produselor, a principiilor, normelor și valorilor codului de etică profesională în cadrul propriei strategii de muncă riguroasă, eficientă și responsabilă. - Aplicarea tehnicilor de muncă eficientă în echipă multidisciplinară pe diverse paliere ierarhice. Identificarea rolurilor și responsabilităților într-o echipă și aplicarea de tehnici de relaționare și muncă eficientă în cadrul echipei. - Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională. - Să demonstreze implicarea în activități științifice, cum ar fi elaborarea unor articole și studii de specialitate. - Să participe la proiecte cu caracter științific, compatibile cu cerințele integrării în învățământul și cercetarea europeană.
--------------------------------	---

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	- Însușirea unor modele fizice și a unor metode numerice avansate pentru simularea proprietăților structurale și dinamice ale sistemelor atomice și moleculare.
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> - Formarea unui mod de gândire algoritmic, specific simulărilor numerice. - Dobândirea capacității de utilizare a unor metode și algoritmi numerici avansați, în cadrul unor proiecte de simulare complexe în domenii ale fizicii computaționale, chimiei fizice, științei materialelor și biofizicii. - Familiarizarea doctoranzilor cu cele mai folosite modele ale fizicii statistice și computaționale în aplicații interdisciplinare. - Încurajarea cercetărilor interdisciplinare. - Însușirea principiilor, metodelor și tehnicilor computaționale pentru calculul diferitelor proprietăți moleculare. - Utilizarea eficientă a resurselor computaționale pentru modelări moleculare. - Formarea abilităților de calcul și analiză a proprietăților atomice și moleculare și a informațiilor digitale.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
Dinamică moleculară avansată. Câmpuri de forțe atomistice și coarse-graining. Propagatori și rezervoare. Simulări în diferite ansamble statistice.	Prelegere, proiecție, problematizare, dezbateri	3h

Implementări moderne ale metodei sumei Ewald pentru interacțiunile electrostatice.		
Modele și elemente fundamentale în utilizarea codurilor NAMD și Gromacs. Analiza traiectoriilor. Aplicații ale dinamicii moleculare în domeniul biomolecular și al științei materialelor.	Prelegere, proiecție, problematizare, dezbateri	2.5h
Analiza spațiului conformațional al moleculelor și modelarea interacțiunilor ligand-receptor. Simularea spectrelor experimentale pe baza populațiilor Boltzmann relative.	Prelegere, problematizare, studii de caz	1.5h
Modelarea interacțiunilor intermoleculare slabe: rolul dispersiei în sistemele moleculare slab legate; Modelarea sistemelor de tip "host-guest"; Modelarea adsorbției moleculelor pe suprafețe.	Prelegere, problematizare, studii de caz	2h
Calculul parametrilor fotofizici ai sistemelor moleculare: modelarea spectrelor de absorbție electronică și emisie de fluorescență; calculul timpului radiativ de fluorescență.	Prelegere, problematizare, studii de caz	2h
Modele teoretice în fizica ciocnirilor atomice: clasificare, arii de utilizare.	Prelegere, problematizare, studii de caz	1.5h
Ionizarea atomilor și a moleculelor prin particule încărcate; efecte de interferență.	Prelegere, problematizare, studii de caz	2h
Ionizarea atomilor prin câmpuri laser intense.	Prelegere, problematizare, studii de caz	2h
9. Modele analitice de bază ale fizicii statistice cu aplicații interdisciplinare: modelul Ising, modelul Kuramoto, modelul de percolare, modelul mersului la întâmplare simplu, ecuații de tip masters.	Prelegere, problematizare, studii de caz	3h
10. Modele computaționale de bază cu aplicații interdisciplinare: modelul "flocking" al lui Vicsek, modelul dunei de nisip (sandpile model), mersul la întâmplare cu restricții, percolații cu obiecte geometrice.	Prelegere, problematizare, studii de caz	2.5h
11. Procesarea de date tip imagine digitală. Metode teoretice de îmbunătățire și analiza datelor tip imagine digitală. Filtre și modalități automate respectiv semiautomate de prelucrare a datelor 2D. Aplicații biomedicale: prelucrarea datelor tip imagini 2D obținute cu microscop de fluorescență, respectiv imagini 2D obținute prin IRM cardiac.	Prelegere, problematizare, studii de caz	3h
12. Tehnici de simulare a efectului zgomotului asupra rezultatelor analizei datelor de tip imagine digitală. Operații și procese automate respectiv semiautomate de prelucrare a datelor 3D. Aplicații biomedicale: prelucrarea datelor tip imagini 3D	Prelegere, problematizare, studii de caz	3h

obținute cu microscop de fluorescență, respectiv imagini 3D obținute prin CT pulmonar.		
--	--	--

Bibliografie

- [1] D. C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation" (Cambridge, 2010).
- [2] T. A. Beu, "Molecular dynamics simulations", <http://phys.ubbcluj.ro/~tbeu/courses.htm>
- [3] NAMD – Scalable Molecular Dynamics, <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
- [4] Martini Coarse Grain Force Field for Biomolecules, <http://cgmartini.nl/>
- [5] Aron J. Cohen, Paula Mori-Sanchez, and Weitao Yang, Challenges for Density Functional Theory, Chem. Rev., 112 (2012) 289-320.
- [6] Carsten A. Ullrich and Zeng-hui Yang, A brief compendium of time-dependent density-functional theory, Braz. J. Phys., 44 (2014) 154-188.
- [7] Petr Lazar, František Karlický, Petr Jurečka, Mikuláš Kocman, Eva Otyepková, Klára Šafářová, and Michal Otyepka, Adsorption of Small Organic Molecules on Graphene, J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 6372–6377, DOI: dx.doi.org/10.1021/ja403162r
- [8] Marika Savarese, Anna Aliberti, Daria De Santo, Edmondo Battista, Filippo Causa, Paolo A Netti and Nadia Rega, Fluorescence Lifetimes and Quantum Yields of Rhodamine Derivatives: New Insights from Theory and Experiment, J. Phys. Chem. A, 2012, 116, 7491-7497, DOI: dx.doi.org/10.1021/jp30214851
- [9] L. Nagy, Multi-electron processes in atomic collisions – Theory, Nucl. Instr. Meth B154 (1999) 23-130.
- [10] L. Nagy, L. Kocbach, K Póra and J.P. Hansen, Interference effects in the ionization of H₂ by fast charged projectiles, J Phys. B 35 (2002) L453-L459.
- [11] S. Borbely, A Toth, K, Tokesi and L. Nagy, Spatial and temporal interference during the ionization of H by few-cycle XUV laser pulses, Phys. Rev. A 87 (2013) 013405.
- [12] R. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics (Dover Books, 2008)
- [13] H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian, Computer Simulation Methods (Addison-Wesley, 2006)
- [14] Advanced Image Processing Techniques and Applications - N. Suresh Kumar, A. Kumar Sangaiah, M. Arun, S. Anand, ISBN-13: 978-1522520535. IGI Global 2017.
- [15] Digital Image Processing – W. Burger, M.J. Burge - Springer 2008 - ISBN 978-1-84628-379-6 - https://imagingbook.files.wordpress.com/2013/06/burgerburgeen20071104_ijreference_letter.pdf

8.2 Seminar	Metode de predare	Observații
1. Tutorial de utilizare a codului NAMD pentru simularea ubiquitinei. Pregătirea modelului molecular și a fișierelor de intrare.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbateri	2h
2. Tutorial de utilizare a codului NAMD pentru simularea ubiquitinei. Analiza traiectoriilor.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbateri	1h
3. Optimizarea conformerilor moleculei fluorodeoxyglucoza și calculul spectrului IR al moleculei, mediat după populațiile Boltzmann relative.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbateri	1h
4. Modelarea adsorbției moleculei de adenină pe o suprafață model de grafenă. Calculul energiei de	Proiecție, demonstrație,	1h

interacțiuni și corecția BSSE.	modelare, dezbatere	
5. Calculul spectrului de absorbție electronică și de emisie de fluorescență pentru molecula de aldehydă solvatată "state specific".	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	1h
6. Aplicațiile actuale ale modelelor în fizica ciocnirilor atomice.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	3h
7. Calcule analitice pentru modelele discutate. Metode de tip mean-field. Ecuații de tip Langevin și Fokker-Planck.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	1.5h
8. Coduri de simulări computaționale pentru modelele discutate. Discuția unor programe simple scrise în C.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	1.5h
9. Metode avansate de prelucrare a datelor 2D. Tehnici automate de segmentare a imaginilor: metode de extragere și caracterizare a inimii din achiziții 2D de IRM cardiac, respectiv a conturilor celulelor și obiectelor de interes din imagini 2D de microscopie de fluorescență.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	1h
10. Metode avansate de prelucrare a datelor 3D. Extragerea și prelucrarea automată a informațiilor relevante: metode de extragere și caracterizare a vaselor plămâni din achiziții 3D de CT pulmonar, respectiv a obiectelor de interes din imagini 3D de microscopie de fluorescență. Modelarea și testarea efectelor diferitelor tipuri de zgomot asupra imaginilor digitale.	Proiecție, demonstrație, modelare, dezbatere	1h
Bibliografie		
[1] NAMD – Scalable Molecular Dynamics, http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/		
[2] P. Geerlings, F. De Proft, W. Langenaeker, Conceptual Density Functional Theory, , Chem. Rev., 103, 1793-1873, (2003)		
[3] J.B. Foresman, A. Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd edition, 2015, http://expchem3.com/		
[4] L. Czipa and L. Nagy, Two-center interference in the ionization of H2 by ion impact: Comparison of different models, Phys. Rev. A 95 (2017) 062709		
[5] L. Nagy, F. Járαι-Szabó and S. Borbély, The effect of projectile wave packet width on the fully differential ionization cross-sections, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 51 (2018) 144005.		
[6] C. Gross, Complex and Adaptive Dynamical Systems (Springer, 2008)		
[7] Z. Neda, Introduction to Stochastic Simulation Methods, http://www.phys.ubbcluj.ro/~zneda/edu/mc.htm		
[8] Platforma ImageJ: http://imagej.net/Introduction		
[9] Platforma ZEN: https://www.zeiss.com/microscopy/int/products/microscope-software/zen-lite.html		

9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Conținutul disciplinei este în concordanță cu ceea ce se studiază în alte centre universitare din țară și din străinătate. Pentru adaptarea la cerințele impuse de piața de muncă, conținutul disciplinei a fost armonizat cu cerințele impuse de specificul învățământului postuniversitar, al institutelor de cercetare și al mediului de afaceri.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Cunoștințe dobândite	Examen	50
10.5 Seminar	Activitate	Prezentare portofoliu	50
10.6 Laborator	Activitate		
10.7 Standard minim de performanță			
Stabilirea corectă a metodelor și modelelor care trebuie utilizate pentru rezolvarea unei probleme particulare.			
Utilizarea adecvată a tehnicilor computaționale și a resurselor hard și soft disponibile.			

Semnătură titular curs	Semnătură titular seminar	
Prof.dr. Titus Beu	Prof.dr. Titus Beu	
Prof.dr. Vasile Chiș	Prof.dr. Vasile Chiș	
Prof.dr. Ladislau Nagy	Prof.dr. Ladislau Nagy	
Prof.dr. Zoltan Neda	Prof.dr. Zoltan Neda	
Conf.dr. Zoltan Balint	Conf.dr. Zoltan Balint	
Data completării	Data avizării în departament	Semnătură director de departament
1.10.2018	5.10.2018	Prof. dr. Simion Aștilean