

Zgłoszenie tematu pracy dyplomowej :: **STUDIA II STOPNIA** ::

<b>Promotor:</b>	<b>dr Wojciech Gwizdała</b>
Temat pracy magisterskiej (j. polski, j.angielski):	<p>Aplikacja z graficznym interfejsem użytkownika wspomagająca przygotowanie plików konfiguracyjnych dla pakietu naukowego NAMD.</p> <p><i>Application with graphical user interface supporting the preparation of configuration files for the NAMD scientific package.</i></p>
Zakres pracy i oczekiwane rezultaty praktyczne:	Celem magistranta jest opis i stworzenie aplikacji z graficznym interfejsem użytkownika służącej do tworzenia i edycji plików wejściowych naukowego pakietu do symulacji komputerowych – NAMD. Oprogramowanie powinno działać sprawnie na systemach operacyjnych z rodziny UNIX oraz Windows.
Aspekt naukowy, problemowy, innowacyjny pracy:	NAMD jest darmowym oprogramowaniem wykorzystywanym do badań naukowych prowadzonych metodą dynamiki molekularnej (MD). Pakiet jest rozwijany przez grupę badawczą Theoretical and Computational Biophysics Group at University of Illinois. W celu uruchomienia eksperymentu numerycznego (symulacja komputerowa) należy przygotować wiele plików konfiguracyjnych. Oprogramowanie z praktycznym i wygodnym interfejsem użytkownika może wspomóc generowanie i edycję danych wejściowych dla pakietu NAMD. W tym celu dyplomant powinien poznać podstawy funkcjonowania tego oprogramowania naukowego i przeanalizować formaty wszystkich niezbędnych plików. Drugim, ważnym elementem pracy jest przeprowadzenie testów własnej aplikacji na różnych platformach systemowych (Unix/Linux, Windows) pod kątem wydajności oraz zgodności działania. Przygotowany zestaw danych wejściowych powinien zostać przetestowany poprzez wykonanie symulacji komputerowych za pomocą oprogramowania NAMD.
*Oprogramowanie, język programowania, środowisko systemowe:	język programowania: dowolny (do uzgodnienia z promotorem), zalecany język programowania: Java (wieloplatformowość)
*Środowisko uruchomieniowe	Unix, Windows
Dodatkowe wymagania i uwagi:	
*Literatura:	<a href="http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/">http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/</a>

\*poła opcjonalne