

Zgłoszenie tematu INŻYNIERSKIEJ pracy dyplomowej

STUDIA I STOPNIA rok akademicki 2021/22

Promotor:	dr Wojciech Gwizdała
Temat pracy dyplomowej (j. polski, j. angielski):	Program wspomagający generowanie plików konfiguracyjnych pakietu DL_POLY służącego do symulacji molekularnych <i>System supporting the generation of DL_POLY configuration files used for molecular simulations</i>
Zakres pracy i oczekiwane rezultaty praktyczne:	Zasadniczym celem pracy jest stworzenie oprogramowania z graficznym interfejsem użytkownika służącego do tworzenia i edycji plików wejściowych naukowego pakietu do symulacji komputerowych – DL_POLY. Jest to darmowe oprogramowanie rozwijane w języku FORTRAN stosowane do badań naukowych prowadzonych metodą dynamiki molekularnej (MD). W celu uruchomienia eksperymentu numerycznego (symulacja komputerowa) należy przygotować dane wejściowe - pliki konfiguracyjne. Oprogramowanie z praktycznym i wygodnym interfejsem użytkownika może wspomóc generowanie i edycję danych wejściowych dla pakietu DL_POLY. Aplikacja powinna w pełni funkcjonować na systemach operacyjnych z rodziny UNIX oraz Windows.
Aspekt inżynierski*:	Dyplomant powinien poznać podstawy funkcjonowania oprogramowania naukowego DL_POLY 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. Przykładowe pliki konfiguracyjne powinny zostać przetestowane poprzez wykonanie symulacji komputerowych za pomocą pakietu DL_POLY.
Wymagane oprogramowanie/języki programowania**:	Należy to uzgodnić z opiekunem pracy.
Środowisko uruchomieniowe**:	Unix/Linux, Windows
Dodatkowe wymagania i uwagi:	Umiejętne korzystanie z dokumentacji w języku angielskim
Literatura**:	ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/DL_POLY/DL_POLY_4.0/DOCUMENTS/USRMAN4.pdf

*należy uzasadnić/wskazać, czy praca spełnia wymagania inżynierskie

**pola opcjonalne