

Wstęp do symulacji komputerowych - course description

General information	
Course name	Wstęp do symulacji komputerowych
Course ID	13.2-WF-FizP-WdSyK-S17
Faculty	Faculty of Physics and Astronomy
Field of study	Physics
Education profile	academic
Level of studies	First-cycle studies leading to Bachelor's degree
Beginning semester	winter term 2018/2019

Course information	
Semester	6
ECTS credits to win	4
Course type	obligatory
Teaching language	polish
Author of syllabus	dr Sebastian Żurek

Classes forms					
The class form	Hours per semester (full-time)	Hours per week (full-time)	Hours per semester (part-time)	Hours per week (part-time)	Form of assignment
Laboratory	45	3	-	-	Credit with grade

Aim of the course

Celem przedmiotu jest zdobycie podstawowej wiedzy na temat wybranych metod symulacji komputerowych dla zagadnień deterministycznych i zagadnień typu Monte Carlo. Student powinien zdobyć umiejętności implementacji tej wiedzy poprzez zaprojektowanie odpowiedniego algorytmu i programu komputerowego a następnie interpretacji otrzymanych wyników symulacji komputerowych i ich prezentacji. Szczegółowe przykłady dotyczyć będą m.in. zagadnień dynamiki molekularnej punktu materialnego i układu punktów materialnych, dynamiki molekularnej z więzami, modelowanie ruchów Brownowskich i innych zdarzeń losowych dla różnych rozkładów zmiennych losowych.

Prerequisites

Umiejętność programowania w języku C/C++, Python lub Java oraz znajomość metod numerycznych.

Scope

- Reprezentacja liczb w pamięci komputera, błędy nadmiaru i niedomiaru, błędy obcięcia (metody różnic skończonych), stabilność numeryczna algorytmów.
- Algorytmy rozwiązywania równań ruchu dla punktu materialnego: algorytm Eulera, Verleta, prędkościowy Verleta, leap-frog, algorytmy predictor-corrector, dobór kroku czasowego, stabilność i dokładność algorytmów, numeryczne rozwiązanie oscylatora harmonicznego 1D i 2D.
- Dynamika molekularna układu punktów materialnych (zespół kanoniczny, zespół izobaryczno izotermiczny, termostaty).
- Algorytmy Monte Carlo (generatory liczb pseudolosowych, rozgrywanie zmiennych losowych z różnymi rozkładami prawdopodobieństwa, algorytm Metropolis, równania stochastyczne).
- Automaty komórkowe.
- Algorytmy genetyczne.

Teaching methods

Wykłady oraz ćwiczenia laboratoryjne, dyskusje, samodzielna praca ze specjalistyczną literaturą naukową w języku polskim oraz angielskim oraz praca z dokumentacją techniczną i wyszukiwanie informacji w sieci Internet

Learning outcomes and methods of theirs verification

Outcome description	Outcome symbols	Methods of verification	The class form
Student poszerza swoje umiejętności zdobywaniu wiedzy w zróżnicowany sposób korzystając z wielu źródeł oraz posiada praktyczną wiedzę dotyczącą umiejętności modelowania z użyciem generatora liczb pseudolosowych i metod deterministycznych.	K1A_U10	- a discussion - a project - an ongoing monitoring during classes	

Outcome description	Outcome symbols	Methods of verification	The class form
Student posiada wiedzę w zakresie: analizy błędu numerycznego, numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych, implementacji i projektowania aplikacji symulujących procesy fizyczne, dynamiki molekularnej układu oddziałujących cząstek, całkowania metodami Monte Carlo, algorytmu Metropolis, analizy wyników numerycznych, generatorów liczb pseudolosowych o rozkładzie dyskretnym i ciągłym	• K1A_W04	• a discussion • a project • an ongoing monitoring during classes	
Posiada umiejętności w domenie analizy danych pochodzących z symulacji komputerowej standardowymi narzędziami i w ramach standardowych metod oraz metod i narzędzi analizy danych, o których wiedza zdobywana jest w trakcie pracy z literaturą naukową	• K1A_U01 • K1A_U02 • K1A_U07	• a discussion • a project • an ongoing monitoring during classes	
Poszerzenie świadomości dotyczącepotrzeby aktualizacji wiedzy merytorycznej dotyczącej dostępnych technik symulacyjnych i wyników badań a także świadomości dotyczącej wpływu badań komputerowych na rozwój technologii, w tym w szczególności nanotechnologii.	• K1A_K04 • K1A_K05	• a discussion • a project • an ongoing monitoring during classes	
Student posiada poszerzoną wiedzę z zakresu fizyki klasycznej układów oddziałujących ze szczególnym uwzględnieniem wpływu wartości parametrów potencjałów oddziaływania na stabilność i zachowanie się badanych układów	• K1A_W01	• a discussion • a project • an ongoing monitoring during classes	

Assignment conditions

Wykład: Pozytywna ocena z testu.

Laboratorium: Pozytywna ocena ze sprawdzianów, wykonanie projektu.

Ocena końcowa z laboratorium: ocena ze sprawdzianów 60%, ocena z projektu 40%.

Przed przystąpieniem do zaliczenia wykładu student musi uzyskać zaliczenie z ćwiczeń laboratoryjnych.

Ocena końcowa: średnia arytmetyczna ocen z zaliczenia wykładu i zaliczenia ćwiczeń laboratoryjnych.

Recommended reading

[1] J. C. Berendsen and W. F. Van Gunsteren, Practical Algorithms for Dynamic Simulations in Molecular dynamics simulations of statistical mechanical systems, Proceedings of the Enrico Fermi Summer School, p.43-45, Soc. Italiana de Fisica, Bologna 1985.

[2] Stephen Wolfram, Statistical mechanics of cellular automata, Rev. Mod. Phys. 55. 601-644 (1983).

[3] Tao Pang, An Introduction to Computational Physics, Cambridge University Press (2006).

Further reading

[1] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery, Numerical recipes, The art of scientific computing, third edition 2007.

Notes

Modified by dr hab. Piotr Lubiński, prof. UZ (last modification: 27-06-2018 17:40)

Generated automatically from SylabUZ computer system