

Applications of computer simulations - opis przedmiotu

Informacje ogólne	
Nazwa przedmiotu	Applications of computer simulations
Kod przedmiotu	13.2-WF-FizD-ACS-S17
Wydział	Wydział Fizyki i Astronomii
Kierunek	Fizyka
Profil	ogólnoakademicki
Rodzaj studiów	drugiego stopnia z tyt. magistra
Semestr rozpoczęcia	semestr zimowy 2018/2019

Informacje o przedmiocie	
Semestr	2
Liczba punktów ECTS do zdobycia	6
Typ przedmiotu	obowiązkowy
Język nauczania	angielski
Sylabus opracował	dr Marcin Kośmider

Formy zajęć					
Forma zajęć	Liczba godzin w semestrze (stacjonarne)	Liczba godzin w tygodniu (stacjonarne)	Liczba godzin w semestrze (niestacjonarne)	Liczba godzin w tygodniu (niestacjonarne)	Forma zaliczenia
Wykład	30	2	-	-	Egzamin
Laboratorium	30	2	-	-	Zaliczenie na ocenę

Cel przedmiotu

The aim of the course is to gain a knowledge of computer simulation methods, their applications, strong and weak sides. Students should acquire skills in implementation of this knowledge by designing the proper algorithms and then interpreting the results of computer simulations.

Wymagania wstępne

Object oriented programming in Java or Python or C++, introduction to computer simulations, basics of MD and MC algorithms and techniques.

Zakres tematyczny

- Random walk – lattice and off-lattice, lattice gas model

- Percolation

- MC simulations of spin system with interactions

- Queue systems

- Computer simulations of polymers

- Basics of Molecular Dynamic – revision

- System with two atom interactions

- Molecular mechanics and force field

- NVE, NPT, NVT ensemble – MD simulations

Metody kształcenia

Lectures and laboratory exercises, discussions, independent work with a specialized scientific literature in Polish and English, and work with the technical documentation and search for information on the Internet.

Efekty uczenia się i metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
They have practical knowledge on modeling using pseudo-random number generator and deterministic methods.		- aktywność w trakcie zajęć - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - projekt	- Wykład - Laboratorium

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Characteristic feature is the expanding awareness of the need to update the technical knowledge on the available techniques and simulation resultss well as awareness of the impact of research on the development of computer technology, including in particular nanotechnology.		• aktywność w trakcie zajęć • dyskusja • egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne • projekt	• Wykład • Laboratorium
Students have an extended knowledge of classical physics of interacting systems. They know numerical error analysis, numerical methods of solving differential equations, they can use molecular dynamics methods, methods of Monte Carlo.		• aktywność w trakcie zajęć • dyskusja • egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne • projekt	• Wykład • Laboratorium
They have skills in data analysis, they posses knowledge which is acquired during studies of the scientific literature.		• aktywność w trakcie zajęć • dyskusja • egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne • projekt	• Wykład • Laboratorium
Students expand their ability to acquire knowledge in different ways using a variety of sources.		• aktywność w trakcie zajęć • dyskusja • egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne • projekt	• Wykład • Laboratorium

Warunki zaliczenia

- **Lecture:** positive evaluation of the practical exam.

- **Laboratory:** evaluation of laboratories of 30%, the assessment of the project 70%.

- Before taking the examination the student needs to obtain passing grade in the laboratory exercises.

- **The final grade:** the arithmetic average of the examination grade and laboratory exercises grade.

Literatura podstawowa

[1] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*, Academic Press 2002.

[2] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press 1990.

[3] D. P. Landau, K. Binder, *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2005.

[4] K. Binder, D. W. Heerman, *Monte Carlo Smulation in Statistical Physics*, Springer 2010. (5th ed).

Literatura uzupełniająca

Uwagi

Zmodyfikowane przez dr hab. Piotr Lubiński, prof. UZ (ostatnia modyfikacja: 28-06-2018 17:44)

Wygenerowano automatycznie z systemu SylabUZ