

Introduction to computer simulations - opis przedmiotu

Informacje ogólne	
Nazwa przedmiotu	Introduction to computer simulations
Kod przedmiotu	13.2-WF-FizP-ICS-S17
Wydział	Wydział Fizyki i Astronomii
Kierunek	Fizyka
Profil	ogólnoakademicki
Rodzaj studiów	pierwszego stopnia z tyt. licencjata
Semestr rozpoczęcia	semestr zimowy 2020/2021

Informacje o przedmiocie	
Semestr	6
Liczba punktów ECTS do zdobycia	7
Występuje w specjalnościach	Fizyka komputerowa
Typ przedmiotu	obowiązkowy
Język nauczania	angielski
Sylabus opracował	dr Sebastian Żurek

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	-	-	Zaliczenie na ocenę
Laboratorium	45	3	-	-	Zaliczenie na ocenę

Cel przedmiotu

The aim of the course is to gain basic knowledge of computer simulations of selected methods for problems of deterministic and Monte Carlo-type issues. Students should acquire skills of implementation of this knowledge by designing an algorithm and a computer program and then interpreting the results of computer simulations. Specific examples will include e.g. problems of molecular dynamics of a single particle, molecular dynamics with constraints, modeling Brownian motion and other random events for different distributions of random variables.

Wymagania wstępne

Programming skills in C / C + +, Python or Java and knowledge of numerical methods.

Zakres tematyczny

- Representation of numbers, excess and underflow errors, truncation error (finite difference method), the stability of numerical algorithms.
- Algorithms for solving the equation of motion: Euler, Verlet, velocity Verlet, leap-frog predictor-corrector algorithm, the choice of the time step, the stability and accuracy of the algorithms, numerical solution of the harmonic oscillator 1D and 2D.
- Monte Carlo algorithms (random number generators, random variables with different probability distributions, Metropolis algorithm, stochastic equations).
- Cellular automata.
- Genetic algorithms.

Metody kształcenia

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

Efekty uczenia się i metody weryfikacji osiągania efektów uczenia się

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Students have an extended knowledge of classical physics of interacting systems with particular emphasis on the impact parameters potential impact on the stability and behavior of the studied systems	K1A_W01	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - projekt	- Wykład - Laboratorium
Students expand their ability to acquire knowledge in different ways using a variety of sources nd has practical knowledge of modeling skills using a pseudorandom number generator and deterministic methods.	K1A_U10	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - projekt	- Wykład - Laboratorium

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Students have has expertise in the following areas: numerical error analysis, numerical solution of differential equations, implementation, and application design to simulate the physical processes of the molecular dynamics of interacting particles, integration methods of Monte Carlo, Metropolis algorithm, the results of numerical analysis, random number generators	• K1A_W04	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
Students have expanding awareness of the need to update the technical knowledge on the available techniques and simulation results as well as awareness of the impact of research on the development of computer technology, including in particular nanotechnology.	• K1A_K04 • K1A_K05	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
They have skills in data analysis from computer simulation using standard tools and standard methods which are acquired during the studies of scientific literature	• K1A_U01 • K1A_U02 • K1A_U07	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium

Warunki zaliczenia

Lecture: positive evaluation of the test.

Laboratory: positive evaluation of the tests, the execution of the project.

The final evaluation of the laboratory: evaluation of tests of 60%, the assessment of the project 40%.

Final grade: arithmetic mean of the completion of the lecture and in classes.

Literatura podstawowa

[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).

Literatura uzupełniająca

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

Uwagi

Zmodyfikowane przez dr hab. Piotr Lubiński, prof. UZ (ostatnia modyfikacja: 04-06-2020 15:13)

Wygenerowano automatycznie z systemu SylabUZ