Wstęp do symulacji komputerowych - opis przedmiotu

Informacje ogólne

Nazwa przedmiotu	Wstęp do symulacji komputerowych
Kod przedmiotu	13.2-WF-FizP-WdSyK-L-S14_pNadGenB5FSS
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	polski
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
Laboratorium	45	3	-	-	Zaliczenie na ocenę
Wykład	30	2	-	-	Zaliczenie na ocenę

Cel przedmiotu

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 rożnych rozkładów zmiennych losowych.

Wymagania wstępne

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

Zakres tematyczny

- 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.

Metody kształcenia

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

Efekty uczenia się i metody weryfikacji osiągania efektów uczenia się

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Student poszerza swoje umiejętnościw 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	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
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	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
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	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
Poszerzenie świadomości dotyczącej potrzeby 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	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium
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	• bieżąca kontrola na zajęciach • dyskusja • projekt	• Wykład • Laboratorium

Warunki zaliczenia

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.

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. Italinana 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: 01-06-2020 16:43)

Wygenerowano automatycznie z systemu SylabUZ