

Modelowanie i symulacje układów fizycznych - course description

General information	
Course name	Modelowanie i symulacje układów fizycznych
Course ID	13.2-WF-FizD-MSUF-S19
Faculty	Faculty of Physics and Astronomy
Field of study	Physics
Education profile	academic
Level of studies	Second-cycle studies leading to MS degree
Beginning semester	winter term 2021/2022

Course information	
Semester	2
ECTS credits to win	6
Available in specialities	Computer Physics
Course type	obligatory
Teaching language	polish
Author of syllabus	dr Marcin Kośmider

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
Lecture	30	2	-	-	Exam
Laboratory	30	2	-	-	Credit with grade

Aim of the course

Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów i zdobycie przez nich podstawowej wiedzy na temat rodzajów symulacji komputerowych, ich zastosowań i ograniczeń. Studenci powinni zdobyć umiejętności pozwalające na zaprojektowanie, implementację i przeprowadzenie eksperymentu komputerowego opartego na symulacji realnego procesu.

Prerequisites

Umiejętność obiektowego programowania w jednym z języków C++ / Java lub Python, ukończony kurs wstępudo symulacji komputerowych, znajomość podstawowych algorytmów MD w układzie NVE oraz elementy metod MC – generatory liczb losowych, całkowanie numeryczne, rozgrywanie zmiennych losowych

Scope

- Przypomnienie informacji o metodach MC – generatory liczb losowych, rozgrywanie zmiennych losowych ciągłych i dyskretnych.
- Błądzenie losowe na sieciach dyskretnych, gaz sieciowy
- Perkolacja
- Symulacje MC układów oddziałujących spinów
- Systemy kolejkowe
- Symulacje komputerowe polimerów
- Przypomnienie podstawowych metod i algorytmów dynamiki molekularnej
- Symulacje układów oddziałujących atomów
- Mechanika molekularna i opis oddziaływań w układach molekularnych
- Symulacje układów NVE, NVT, NPT

Teaching methods

Wykład:

Wykład konwencjonalny, problemowy, pokaz, dyskusja, warsztaty (testowanie aktualnie omawianych fragmentów kodu), burza mózgów

Laboratoria:

Ćwiczenia laboratoryjne, metoda projektu, praca w grupie, giełda pomysłów, burza mózgów, prezentacja, praca z dokumentacją, samodzielne pozyskiwanie wiedzy

Learning outcomes and methods of theirs verification

Outcome description	Outcome symbols	Methods of verification	The class form
---------------------	-----------------	-------------------------	----------------

Outcome description	Outcome symbols	Methods of verification	The class form
Student poszerza swoje umiejętności w zdobywaniu wiedzy w zróżnicowany sposób korzystając z wielu źródeł	• K2_U10	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory
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	• K2_W01	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory
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	• K2_K01 • K2_K05	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory
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	• K2_W05	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory
Student posiada praktyczną wiedzę dotyczącą umiejętności modelowania z użyciem generatora liczb pseudolosowych i metod deterministycznych	• K2_W02	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory
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	• K2_U03 • K2_U05 • K2_U10	• a discussion • a project • an exam - oral, descriptive, test and other • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory

Assignment conditions

Wykład:

Egzamin praktyczny polegający na przedstawieniu rozwiązaniu postawionego(wylosowanego z listy problemów) problemu. Ocenie końcowej podlega analiza problemu, przedstawienie algorytmów rozwiązania problemu oraz opis weryfikacji uzyskanych wyników.

Laboratorium:

Ocena końcowa z laboratorium składa się w 30% z średniej ocen uzyskanych w trakcie laboratoriów i w 70% z oceny końcowej projektu.
Przed przystąpieniem do egzaminu student musi uzyskać zaliczenie z ćwiczeń laboratoryjnych.

Ocena końcowa: średnia arytmetyczna ocen egzaminu i zaliczenia ćwiczeń laboratoryjnych.

Recommended reading

- [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 Simulation in Statistical Physics Springer, 2010 (5th ed)

Further reading

Notes

Modified by dr Marcin Kośmider (last modification: 09-05-2021 21:25)

Generated automatically from SyllabUZ computer system