

INTRODUCTION TO COMPUTER SIMULATIONS - course description

General information	
Course name	INTRODUCTION TO COMPUTER SIMULATIONS
Course ID	13.2-WF-FizP-WdSyK-L-S14_pNadGenB5FSS
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 2021/2022

Course information	
Semester	6
ECTS credits to win	7
Available in specialities	Computer Physics
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
Lecture	30	2	-	-	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	- Lecture - Laboratory

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	• Lecture • Laboratory
Posiada umiejętności w zakresie: 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	• 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.	• K1A_K04 • K1A_K05	• a discussion • a project • 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	• K1A_W01	• a discussion • a project • an ongoing monitoring during classes	• Lecture • Laboratory

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 Marcin Kośmider (last modification: 11-05-2021 16:45)

Generated automatically from SyllabUZ computer system