

Symulacje komputerowe w zastosowaniach - opis przedmiotu

Informacje ogólne	
Nazwa przedmiotu	Symulacje komputerowe w zastosowaniach
Kod przedmiotu	11.3-WF-FizD-SKwZa-L-S14_genXWK0E
Wydział	Wydział Fizyki i Astronomii
Kierunek	Fizyka
Profil	ogólnoakademicki
Rodzaj studiów	drugiego stopnia z tyt. magistra
Semestr rozpoczęcia	semestr zimowy 2017/2018

Informacje o przedmiocie	
Semestr	2
Liczba punktów ECTS do zdobycia	6
Typ przedmiotu	obowiązkowy
Język nauczania	polski
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

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.

Wymagania wstępne

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

Zakres tematyczny

- 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

Metody kształcenia

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

Efekty uczenia się i metody weryfikacji osiągania efektów uczenia się

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
-------------	-----------------	--------------------	-------------

Opis efektu	Symbol e efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Student poszerza swoje umiejętności w zdobywaniu wiedzy w zróżnicowany sposób korzystając z wielu źródeł	K2_U10	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - 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	K2_W01	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - 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	K2_K01 K2_K05	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - projekt	- Wykład - Laboratorium
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	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - projekt	- Wykład - Laboratorium
Student posiada praktyczną wiedzę dotyczącą umiejętności modelowania z użyciem generatora liczb pseudolosowych i metod deterministycznych	K2_W02	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - 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	K2_U03 K2_U05 K2_U10	- bieżąca kontrola na zajęciach - dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - projekt	- Wykład - Laboratorium

Warunki zaliczenia

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.

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

Literatura uzupełniająca

Uwagi

Zmodyfikowane przez prof. dr hab. Mirosław Dudek (ostatnia modyfikacja: 13-09-2017 11:11)

Wygenerowano automatycznie z systemu SylabUZ