

1.	Nazwa kierunku	fizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2022/2023 (semestr zimowy), 2023/2024 (semestr zimowy), 2024/2025 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Numerical Methods

Kod modułu: W4-2F-22-11

1. Liczba punktów ECTS: 4

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
2F_11_1	zna podstawy technik obliczeniowych i informatycznych, wspomagających pracę fizyka i rozumie ich ograniczenia	KF_W07	5
2F_11_2	zna formalizm matematyczny przydatny w konstruowaniu i analizie modeli fizycznych o średnim poziomie złożoności; rozumie konsekwencje stosowania metod przybliżonych	KF_W06	2
2F_11_3	umie zastosować aparat matematyczny do rozwiązywania problemów fizycznych o średnim stopniu złożoności	KF_U02	3

3. Opis modułu

Opis	<p>1. Historia klasycznych i ab initio metod symulacyjnych.</p> <p>2. Potencjały oddziaływań międzyatomowych. Modele cząsteczek sztywnych i niesztywnych, oddziaływania wewnątrz- i międzycząsteczkowe. Konstruowanie potencjału międzycząsteczkowego. Układy molekularne izolowane i masowe (okresowe warunki brzegowe, konwencja najbliższego obrazu, sferyczne obcięcie oddziaływania).</p> <p>3. Typowe kształty skrzynki do symulacji komputerowej. Deterministyczne metody symulacji komputerowych: Newtonowskie równania ruchu układów atomowych (środki mas cząsteczkowych), metody rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych (algorytm Verleta, metoda przeskoku-żaby (leap-frog) , postać prędkości algorytmu Verleta, metoda korektora predykcyjnego)</p> <p>4. Dynamika molekularna cząsteczek sztywnych, opis ruchu obrotowego (kwaterniony), metody rozwiązywania równań Eulera (metoda przeskoku i predyktora-korektora), dynamika ograniczeń – metoda SHAKE, dynamika molekularna sfer twardych.</p> <p>5. Konfiguracja początkowa (położenia, orientacje i prędkości zgodnie z wymaganą temperaturą), eliminacja pędu całkowitego, jednostki zredukowane (wewnętrzne), parametry kontrolne w biegu równoważącym, siły, przesunięte i przesunięte potencjały siły.</p> <p>6. Oddziaływania długozasięgowe (oddziaływania kulombowskie i dipolowe), metoda sumowania Ewalda, błędy sumowania w przestrzeni rzeczywistej i odwrotnej – dobór parametru zbieżności i promieni odcięcia w metodzie Ewalda, ładunki cząstkowe w cząsteczkach polarnych.</p> <p>7. Wartości średnie i fluktuacje, uogólnione ekwipartycje, proste średnie termodynamiki (energia, temperatura, ciśnienie), średnie transformujące między zespołami statystycznymi, ciepło właściwe.</p>
-------------	--

	<p>8. Właściwości strukturalne (funkcja rozkładu par, współczynnik struktury), długozasięgowa korekcja energii i ciśnienia.</p> <p>9. Funkcje korelacji czasu i współczynniki transportu (współczynnik dyfuzji – zależność Einsteina i funkcja korelacji prędkości), równanie dyfuzji w przestrzeni ograniczonej.</p> <p>10. Dynamika molekularna dla zespołów mikrokanonicznych, kanonicznych (metoda ograniczeń, skalowanie prędkości, układ rozszerzony i metoda Berendsena), zespoły izobaryczne i izobaryczno-izotermiczne.</p> <p>11. Stochastyczne metody symulacji komputerowych: dynamika Browna, metody Monte Carlo (metoda Metropolis, izotermiczno-izobaryczna i wielkokanoniczna Monte Carlo).</p> <p>12. Podstawowe techniki dynamiki molekularnej ab initio: dynamika molekularna Ehrenfesta (EMD), dynamika Borna-Oppenheimera (BOMD) i dynamika molekularna Car-Parinello (CPMD) (lagrangian i równania ruchu). Siły Hellmanna-Feynmana. Porównanie metod ab initio dynamiki molekularnej.</p> <p>13. Sprzężenie CPMD z teorią funkcjonału gęstości. Implementacja CPMD z falami płaskimi. Energia elektrostatyczna, energia wymiany i korelacji. Optymalizacja orbitali Kohna-Shama. Organizacja i układ programu.</p> <p>14. Atomy z falami płaskimi – pseudopotencjały, termostaty i barostaty, hybrydowa kwantowa/klasyczna dynamika molekularna.</p> <p>15. Zastosowanie ab initio dynamiki molekularnej – od materiałów do biocząsteczek. Właściwości z symulacji ab initio: analiza struktury elektronowej, spektroskopia w podczerwieni, spektroskopia NMR i EPR.</p>
Wymagania wstępne	Zdolność programowania w dowolnym języku umożliwiającym programowanie proceduralne (zalecany Fortran 90/95 lub C/C++). Znajomość podstaw analizy matematycznej (różniczkowanie i całkowanie) oraz algebry liniowej.

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu

kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
2F_11_w_1	test/kolokwium	Cztery razy w semestrze; zadania polegają na napisaniu kilku programów z wykorzystaniem poznanych metod numerycznych	2F_11_1, 2F_11_2, 2F_11_3
2F_11_w_2	egzamin pisemny (przy komputerze)	Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest zaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych; zakres materiału – wszystkie zagadnienia omawiane na wykładach; skala ocen 2-5;	2F_11_1, 2F_11_2, 2F_11_3

5. Rodzaje prowadzonych zajęć

kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów uczenia się
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
2F_11_fs_1	wykład	omówienie zagadnień będących tematem wykładu z wykorzystaniem prezentacji multimedialnych oraz przeprowadzanych „na żywo” ilustracji działania programów. Materiały do wykładu udostępnione na platformie e-learningowej.	10	Zapoznanie się z materiałami umieszczonymi na platformie e-learningowej oraz notatkami z wykładów; praca z podręcznikiem	40	2F_11_w_2
2F_11_fs_2	laboratorium	samodzielne pisanie i uruchamianie programów komputerowych; dyskusja przy tablicy: metody podejścia do konkretnych problemów fizycznych, algorytmizacji zagadnienia i pojawiających się problemów.	30	Rozwiązywanie zadań (pisanie programów) umieszczonych na platformie e-learningowej,	90	2F_11_w_1