

1.	Nazwa kierunku	fizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2025/2026 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

7.	Informacje podstawowe o module	
Nazwa modułu		Numerical Methods
Kod modułu		W4-FZ-NM-S2-1-22-11
Liczba punktów ECTS		4
Język wykładowy		angielski
Cel i opis treści kształcenia		1. Historia klasycznych i ab initio metod symulacyjnych. 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). 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) 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. 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. 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. 7. Wartości średnie i fluktuacje, uogólnione ekwipartycje, proste średnie termodynamiki (energia, temperatura, ciśnienie), średnie transformujące między zespołami statystycznymi, ciepło właściwe. 8. Właściwości strukturalne (funkcja rozkładu par, współczynnik struktury), długozasięgowa korekcja energii i ciśnienia. 9. Funkcje korelacji czasu i współczynniki transportu (współczynnik dyfuzji – zależność Einsteina i funkcja korelacji prędkości), równanie dyfuzji w przestrzeni ograniczonej. 10. Dynamika molekularna dla zespołów mikrokanonicznych, kanonicznych (metoda ograniczeń, skalowanie prędkości, układ rozszerzony i metoda Berendsena), zespoły izobaryczne i izobaryczno-izotermiczne. 11. Stochastyczne metody symulacji komputerowych: dynamika Browna, metody Monte Carlo (metoda Metropolis, izotermiczno-izobaryczna i wielkokanoniczna Monte Carlo). 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. 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. 14. Atomy z falami płaskimi – pseudopotencjały, termostaty i barostaty, hybrydowa kwantowa/klasyczna dynamika molekularna. 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.

Lista modułów koniecznych do zaliczenia przed przystąpieniem do tego modułu (o ile to konieczne)	nie dotyczy
--	-------------

8. Zakładane efekty uczenia się modułu

Kod	Opis	Efekty uczenia się kierunku	Stopień realizacji (skala 1-5)
E1	zna podstawy technik obliczeniowych i informatycznych, wspomagających pracę fizyka i rozumie ich ograniczenia	KF_W07	5
E2	zna formalizm matematyczny przydatny w konstruowaniu i analizie modeli fizycznych o średnim poziomie złożoności; rozumie konsekwencje stosowania metod przybliżonych	KF_W06	2
E3	umie zastosować aparat matematyczny do rozwiązywania problemów fizycznych o średnim stopniu złożoności	KF_U02	3

9. Metody prowadzenia zajęć

Kod	Kategoria	Nazwa (opis)
a01	Zbiór metod asymilacji wiedzy / podających	Wykład informacyjny/kursowy systematyczny kurs z określonej dyscypliny naukowej w ujęciu syntetycznym; realizacja zakłada bierny odbiór przekazanych informacji
d01	Zbiór metod programowanych	Praca z komputerem np. Webquest - realizacja zadań edukacyjnych z wykorzystaniem urządzeń elektronicznych, cyfrowych, programów komputerowych i aplikacji internetowych; NA pełni funkcję konsultanta; praca studentów przebiega według określonego przez osobę prowadzącą zajęcia planu z uwzględnieniem etapów i instrukcji oraz zmierza do wypracowania wskazanych rezultatów w ustalonym terminie

10. Formy prowadzonych zajęć

Kod	Nazwa	Liczba godzin	Sposób weryfikacji efektów uczenia się	Efekty uczenia się modułu	Metody prowadzenia zajęć
FZ1	wykład	10	egzamin	E1, E2	a01
FZ2	laboratorium	30	zaliczenie	E3	d01

11. Praca studenta poza udziałem w zajęciach obejmuje w szczególności:

Kod	Kategoria	Nazwa (opis)	Czy częściowo zalicza się do BUNA-y?
a02	Przygotowanie do zajęć	Czytanie literatury / analiza materiałów źródłowych czytanie literatury wskazanej w sylabusie; przegląd, porządkowanie, analiza i wybór materiałów źródłowych do wykorzystania w ramach zajęć	Nie
a03	Przygotowanie do zajęć	Ćwiczenie praktycznych umiejętności czynności polegające na powtarzaniu, doskonaleniu i utrwalaniu praktycznych umiejętności, w tym ćwiczonych podczas odbytych wcześniej zajęć lub nowych, niezbędnych z punktu widzenia realizacji kolejnych elementów programu (jako przygotowanie się uczestnictwa w zajęciach)	Tak
b01	Konsultowanie programu i organizacji zajęć	Zapoznanie się z zapisami sylabusu przeglądanie zawartości sylabusu i zapoznanie się z treścią jego zapisów	Nie

c02	Przygotowanie do weryfikacji efektów uczenia się	Studiowanie wykorzystanej literatury oraz wytworzonych w ramach zajęć materiałów <i>wgłębianie się, dociekanie, rozważanie, przyswajanie, interpretacja lub porządkowanie wiedzy pochodzącej z literatury, dokumentacji, instrukcji, scenariuszy, itd., wykorzystanych na zajęciach oraz z notatek lub innych materiałów/wytworów sporządzonych w ich trakcie</i>	Tak
c03	Przygotowanie do weryfikacji efektów uczenia się	Realizacja indywidualnego lub grupowego zadania zaliczeniowego/egz./etapowego <i>zbiór czynności zmierzających do wykonania zadania zleconego do realizacji poza zajęciami, jako obligatoryjnego etapu/elementu weryfikacji przypisanych do tych zajęć efektów uczenia się</i>	Tak
d01	Konsultowanie wyników weryfikacji efektów uczenia się	Analiza korekt/informacji zwrotnej ze strony NA dotyczących wyników wer. ef. ucz. <i>przegląd uwag, ocen i opinii sporządzonych przez NA odnoszących się do realizacji zadania sprawdzającego poziom osiągniętych efektów uczenia się</i>	Nie

Informacje dotyczące szczegółów realizacji modułu w danym roku akademickim znajdują się w sylabusie dostępnym w systemie USOS: <https://usosweb.us.edu.pl>.