

1.	Field of study	Technical Physics
2.	Academic year of entry	2017/2018 (winter term)
3.	Level of qualifications/degree	first-cycle studies (in engineering)
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Methods of Computer Simulations part 1

Module code: 0305-1FT-12-50.1

1. Number of the ECTS credits: 4

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
1FT_50.1_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metod Monte Carlo	KFT_W08	5
1FT_50.1_2	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych.	KFT_W08	5
1FT_50.1_3	Zna metody rozwiązywania równań różniczkowych na siatkach.	KFT_W08	5
1FT_50.1_4	Potrafi napisać implementacje procedur w symulacjach komputerowych dynamiki molekularnej lub Monte Carlo.	KFT_U11	4
1FT_50.1_5	Potrafi rozwiązać zagadnienie przepływu lub transportu stosując jedną z prezentowanych metod.	KFT_U09	4

3. Module description	
Description	<p>Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Klasyczne symulacje komputerowe – oddziaływania między-atomowe; modele cząsteczek; periodyczne warunki brzegowe; konwencja najbliższych obrazów; obcięcie sferyczne. -Symulacja dynamiki molekularnej: równania ruchu Newtona dla układów atomów, metody rozwiązywania równań różniczkowych, symulacja sztywnych molekuł – opis ruchu rotacyjnego i rozwiązywanie równań ruchu; dynamika z więzami – algorytm SAKE, konfiguracja początkowa, eliminacja pędu całkowitego układu, jednostki zredukowane, parametry kontrolne w etapie dochodzenia układu do równowagi, siły i przesunięty potencjał, oddziaływania dalekiego zasięgu, metoda sumowania Ewalda, ładunki ułamkowe w cząsteczkach dipolowych, proste średnie termodynamiczne (energia, temperatura, ciśnienie), transformacja wartości średnich między zespołami statystycznymi, ciepło właściwe. Własności strukturalne (dwójkowa funkcja rozkładu, statyczny czynnik struktury), daleko-zasięgowe poprawki energii potencjalnej i ciśnienia, czasowe funkcje korelacji, czasy korelacji i współczynniki transportu, dynamika molekularna dla różnych zespołów statystycznych. -Stochastyczne symulacje komputerowe: metody Monte Carlo dla różnych zespołów statystycznych. -Praktyczny wstęp do symulacji ośrodków ciągłych (cieczy i ośrodków sprężystych). Metody rozwiązywania równań różniczkowych na siatkach

	<p>(FDM,FEM,FVM). Metody cząsteczkowe. Rozwiązywanie równań transportu.</p> <p>W trakcie zajęć laboratoryjnych poznana na wykładach wiedza wykorzystana będzie do opracowania projektu obejmującego program symulacji dynamiki molekularnej lub Monte Carlo układu atomów oraz rozwiązanie zagadnienia przepływu lub transportu.</p> <p>Przedmiot obowiązkowy w semestrze 5 dla specjalności Nowoczesne materiały i techniki pomiarowe; wykład zakończony egzaminem.</p>
Prerequisites	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej i fizyki statystycznej, znajomość języków programowania (Fortran, C/C++)

4. Assessment of the learning outcomes of the module			
code	type	description	learning outcomes of the module
1FT_50.1_w_1	projekt	Podstawą zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest projekt mający na celu uruchomienie programu symulacji dynamiki molekularnej lub Monte Carlo układu atomów oraz rozwiązanie zagadnienia przepływu lub transportu	1FT_50.1_4, 1FT_50.1_5
1FT_50.1_w_2	egzamin ustny	Trzy pytania z zagadnień wykładu (symulacje dynamik molekularnej i Monte Carlo oraz metod rozwiązywania równań różniczkowych) Egzamin obowiązkowy dla sp. Modelowanie komputerowe w semestrze 6	1FT_50.1_1, 1FT_50.1_2, 1FT_50.1_3

5. Forms of teaching						
code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
1FT_50.1_fs_1	lecture	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej.	15	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca.	30	1FT_50.1_w_2
1FT_50.1_fs_2	laboratory classes	opracowanie projektu	15	lektura uzupełniająca, praca nad projektem	30	1FT_50.1_w_1