

1.	Field of study	Physics
2.	Academic year of entry	2017/2018 (winter term), 2018/2019 (winter term)
3.	Level of qualifications/degree	second-cycle studies
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Numerical Methods

Module code: 0305-2F-13-11

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)
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. Module description	
Description	<p>History of classical and ab initio simulation methods. Inter-atomic interaction potentials. Models of rigid and non-rigid molecules, intra- and inter-molecular interactions.</p> <p>Constructing an intermolecular potential. Isolated and bulk molecular systems (periodic boundary conditions, the nearest image convention, spherical truncation of interaction). Typical shapes of computer simulation box.</p> <p>Deterministic methods of computer simulations: Newtonian equations of motion for atomic systems (centers of molecular masses), methods for solution of ordinary differential equations (the Verlet algorithm, the leap-frog method, the velocity form of the Verlet algorithm, predictor corrector method).</p> <p>4. Molecular dynamics of rigid molecules, description of rotational motion (quaternions), methods for solution of the Euler's equations (the leap-frog and predictor-corrector method), constraint dynamics – SHAKE method, molecular dynamics of hard spheres.</p> <p>5. The initial configuration (positions, orientations and velocities in accordance with the required temperature), elimination of the total momentum, reduced (internal) units, control parameters in the equilibration run, forces, shifted and shifted-force potentials.</p> <p>6. Long-range interactions (Coulomb and dipole interactions), Ewald summation method, errors of summation in the real and reciprocal space – selection of the convergence parameter and cut-off radii in the Ewald method, partial charges in polar molecules.</p> <p>7. Average values and fluctuations, generalized equipartition, simple thermodynamics averages (energy, temperature, pressure), transforming averages between statistical ensembles, the specific heat.</p> <p>8. Structural properties (pair distribution function, structure factor), long-range correction of energy and pressure.</p> <p>9. Time correlation functions and transport coefficients (the diffusion coefficient – the Einstein relation and the velocity correlation function), the diffusion</p>

	<p>equation in restricted space.</p> <p>10. Molecular dynamics for micro-canonical, canonical (constraint method, velocity scaling, extended system and Berendsen method), isobaric and isobaric-isothermic ensembles.</p> <p>11. Stochastic methods of computer simulations: brownian dynamics, Monte Carlo methods (the Metropolis method, isothermic-isobaric and grand canonical Monte Carlo).</p> <p>12. Basic techniques of ab initio molecular dynamics: Ehrenfest molecular dynamics (EMD), Born-Oppenheimer one (BOMD) and Car-Parinello molecular dynamics (CPMD) (lagrangian and equations of motion). Hellmann-Feynman forces. Comparison of the ab initio molecular dynamics methods.</p> <p>13. Conjunction of CPMD with the density functional theory. Implementation of the CPMD with plane waves. Electrostatic energy, exchange and correlation energy. Optimizing the Kohn-Sham orbitals. Program organization and layout.</p> <p>14. Atoms with plane waves – pseudo-potentials, thermostats and barostats, hybrid quantum/classical molecular dynamics.</p> <p>15. Application of the ab initio molecular dynamics – from materials to biomolecules. Properties from ab initio simulations: electronic structure analyses, infrared spectroscopy, NMR and EPR spectroscopy.</p>
Prerequisites	Umiejętność programowania w dowolnym języku pozwalającym na programowanie proceduralne (zalecany Fortran 90/95 lub C/C++), Znajomość podstaw analizy matematycznej (różniczkowanie i całkowanie) oraz algebry liniowej.

4. Assessment of the learning outcomes of the module			
code	type	description	learning outcomes of the module
2F_11_w_1	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 konwersatorium; zakres materiału – wszystkie zagadnienia omawiane na wykładach; skala ocen 2-5;	2F_11_1, 2F_11_2, 2F_11_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	
2F_11_fs_1	lecture	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	Zapoznavanie się z materiałami umieszczonymi na platformie e-learningowej oraz notatkami z wykładów; praca z podręcznikiem	30	2F_11_w_1, 2F_11_w_2
2F_11_fs_2	laboratory classes	samodzielne pisanie i uruchamianie programów komputerowych; dyskusja przy tablicy: metod podejścia do konkretnych problemów fizycznych, algorytmizacji zagadnienia i pojawiających się problemów.	30	Rozwiązywanie zadań (pisanie programów) umieszczonych na platformie e-learningowej,	30	2F_11_w_1