

Sylabus przedmiotu

Przedmiot:	Wykład ogólnouniwersytecki
Kierunek:	Chemia, I stopień [6 sem], stacjonarny, ogólnoakademicki, rozpoczęty w: 2014
Tytuł lub szczegółowa nazwa przedmiotu:	Symulacje komputerowe w naukach przyrodniczych
Rok/Semestr:	I/1
Liczba godzin:	30,0
Nauczyciel:	Borówko Małgorzata, prof. dr hab.
Forma zajęć:	wykład
Rodzaj zaliczenia:	zaliczenie na ocenę
Punkty ECTS:	1,0
Godzinowe ekwiwalenty punktów ECTS (łącznie liczba godzin w semestrze):	0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie konsultacji 30,0 Godziny kontaktowe z prowadzącym zajęcia realizowane w formie zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zajęć dydaktycznych 0 Przygotowanie się studenta do zaliczeń i/lub egzaminów 0 Studiowanie przez studenta literatury przedmiotu
Poziom trudności:	podstawowy
Wstępne wymagania:	brak
Metody dydaktyczne:	• wykład informacyjny
Zakres tematów:	<p>Plan wykładu:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Klasyfikacja metod symulacyjnych 2. Rys historyczny: Rozwój technik obliczeniowych. Pierwsze symulacje 3. Modele w naukach przyrodniczych: Elementy modelu. Oddziaływania międzycząsteczkowe. Przykłady znanych modeli: gaz doskonały, model Isinga. 4. Elementy mechaniki 5. Elementy termodynamiki statystycznej <p>Metoda Monte Carlo: Ogólny schemat. Zasady tworzenia algorytmu (mikroskopowa odwracalność, ergodyczność). Podstawowe zagadnienia techniczne. Symulacje w różnych zespołach statystycznych. Wybrane zastosowania metody Monte Carlo (warstwy powierzchniowe, nanocząsteczki Janusa, przemiany fazowe, szczotki polimerowe, reakcje chemiczne).</p> <ol style="list-style-type: none"> 6. Dynamika molekularna: Podstawowy schemat. Termostaty. Wybrane zastosowania dynamiki molekularnej (polimery, DNA, osadzanie warstw metalicznych, wirusy). 6. Algorytmy genetyczne. 7. Automaty komórkowe : Podstawowy schemat. Model segregacji Schellinga. Model kopca piasku Par Baka (lawiny). Modelowanie ruchu ulicznego. Wzory w przyrodzie. 8. Fraktale. 9. Model perkolacji - zastosowania 10. Rozprzestrzenianie się epidemii - modele deterministyczne i stochastyczne. 11. Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń w środowisku.
Forma oceniania:	• obecność na zajęciach
Literatura:	<ol style="list-style-type: none"> 1. A. Patrykiewicz, Wprowadzenie do metody Monte Carlo, Wydawnictwo UMCS, Lublin 1998. 2. D.W. Herman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997. 3. D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular simulation, Academic Press, Londyn, 2002.