



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputerowe modelowanie metodami cząstek, PG_00058709						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2023/2024		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		5.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr inż. Szymon Winczewski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu		dr inż. Szymon Winczewski				
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	60		5.0		60.0	125
Cel przedmiotu	Omówienie metod cząstek w zastosowaniu do zagadnień modelowania układów w skali nano. Szczegółowe omówienie metody dynamiki molekularnej: teorii (całkowanie równań ruchu) oraz zagadnień praktycznych (stosowane potencjały, warunki brzegowe, inicjalizacja symulacji, sąsiedztwo, promień odcięcia). Krótki przegląd bardziej zaawansowanych zagadnień z dziedziny dynamiki molekularnej (wybrane zagadnienia: np. molekuly sztywne, model powłokowy, dynamika z więzami, termostaty, barostaty, metoda Ewalda).						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W02] Ma pogłębioną, podbudowaną teoretycznie, szczegółową wiedzę w zakresie wybranego działu nanotechnologii oraz, w stopniu adekwatnym do potrzeb, w zakresie pokrewnych dziedzin nauki lub techniki.	Posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę w zakresie klasycznych podejść symulacyjnych do badania układów w nanoskali, rozumie ich ogólną zasadę działania, ale także najważniejsze niuanse oraz ograniczenia. Jest w stanie samemu zastosować metodę dynamiki molekularnej do badania nieskomplikowanych układów.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_W05] Posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur.	Student dysponuje pogłębioną znajomością metod cząstek (dynamiki molekularnej) i jest świadom ich ograniczeń, potrafi umiejscowić metody klasyczne i kwantowe w krajobrazie metod obliczeniowych używanych w nanoskali.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U03] Posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego.	Student jest w stanie samodzielnie przeprowadzić symulację metodą dynamiki molekularnej przy użyciu pakietu LAMMPS oraz zinterpretować najważniejsze otrzymane wyniki.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
[K7_U06] Potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie – w ramach specjalności.	Student potrafi zaplanować i przeprowadzić prostą symulację przy wykorzystaniu pakietu LAMMPS oraz dokonać krytycznej analizy otrzymanych wyników, przeprowadzić wizualizację trajektorii, wykreślić wykresy kluczowych parametrów symulacji.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
Treści przedmiotu	<p>Najważniejsze pytania, które stawiamy modelując układy w skali nano. Czym jest cząstka? Równanie dynamiczne. Metody klasyczne i kwantowe, skalowanie nakładu obliczeniowego. Metoda dynamiki molekularnej, jej zalety i ograniczenia, zachowanie energii w mechanice newtonowskiej. Przestrzeń fazowa i trajektorie. Periodyczne i mieszane warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, kwazinieskończoność, ograniczenia podejścia PBC. Promień odcięcia i jego konsekwencje. Metoda cel połączonych Hockneya i lista sąsiadów Verleta. Sposoby inicjowania symulacji (położeń, prędkości), równoważenie. Metody całkowania równań ruchu. Metoda Verleta, leapfrog, metody predictor-corrector. Źródła błędów całkowania równań ruchu. Wizualizacja w symulacjach MD i obliczanie obserwabli makroskopowych (energii, temperatury, wiriału, ciśnienia, ciepła właściwego, RDF, ADF, S(k), MSD, D(T)). Potencjał i jego związek z siłą. Ogólne i szczególne formy potencjałów. Potencjały LJ, miękkich i sztywnych kul, Borna-Mayera, harmoniczny, Morse'a, Stillinger-Webera, Suttona-Chena, GAFF). Polaryzowalność i modele powłokowe (Cochrana, Finchama). Dynamika z więzami, podejście formalne, SHAKE, RATTLE, QSHAKE. Molekuły sztywne w symulacjach MD, kąty Eulera, macierz obrotów, przekształcenia wektorów, kwaterniony. Oddziaływania kulombowskie w symulacjach MD, metoda Ewalda. Zespoły NVT i NPT, termostaty prymitywne, termostaty i barostaty ESM i CSM. Metody hybrydowe (QM/MM).</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Student jest zaznajomiony z mechaniką newtonowską. Student zna podstawy budowy materii. Student znapodstawy analizy matematycznej i algebry.</p>		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	laboratorium komputerowe	50.0%	50.0%
	kolokwium zaliczeniowe	50.0%	50.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004.
	Uzupełniająca lista lektur	1. D. Frenkel, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001. 2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1989. 3. V. Bulatov, W. Cai, Computer simulations of dislocations, Oxford University Press, 2006. 4. E.B. Tadmor, R.F. Miller, Modeling Materials, Cambridge University Press, 2011.
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie: Komputerowe modelowanie metodami cząstek - Moodle ID: 33884 <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=33884">https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=33884</a>

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Jakie są typowe rozmiary układu i skale czasowe dla których przeprowadza się symulacje metodą dynamiki molekularnej? Dlaczego metody continuum nie mają zastosowania dla tego typu układów?</li> <li>2. Jakie są główne różnice między klasycznymi a kwantowymi metodami obliczeniowego badania układów w skali nano?</li> <li>3. Pokróćce (w kilku-kilkunastu zdaniach) wyjaśnij w jaki sposób działa metoda dynamiki molekularnej(MD).</li> <li>4. Kiedy energia całkowita jest zachowana w symulacji metodą MD, a kiedy nie jest?</li> <li>5. Jakie są główne ograniczenia metody dynamiki molekularnej?</li> <li>6. Omów pojęcie periodycznych warunków brzegowych na czym polegają, w jakim celu się je stosuje, jakie są ich ograniczenia i trudności związane z ich stosowaniem.</li> <li>7. Krótko opisz techniki numeryczne, które umożliwiają zwiększenie wydajności (przyspieszenie) symulacji metodą MD.</li> <li>8. Co to jest promień odcięcia potencjału? Po co się go stosuje? Jakie trudności wiążą się z przyjęciem skończonego promienia odcięcia?</li> <li>9. Opisz metodę cel połączonych Hockneya oraz technikę listy Verleta. Co umożliwiają te techniki? Streść wady i zalety każdej z nich.</li> <li>10. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji cieczy za pomocą metody MD.</li> <li>11. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji kryształu za pomocą metody MD.</li> <li>12. Do czego służy i w jaki sposób jest realizowana technika skew start?</li> <li>13. Na czym polega proces równoważenia (equilibration) układu w symulacji metodą MD? Wymień kilka najważniejszych zasad którymi kierował(a)byś przeprowadzając równoważenie.</li> <li>14. Wyprowadź wzory Verleta na prędkość oraz na położenie w kolejnym kroku symulacji.</li> <li>15. Do czego służą i na czym polegają algorytmy typu predictor-corrector? Jakie są ich zalety w porównaniu z konkurencyjnymi algorytmami?</li> <li>16. Czym jest radialna funkcja rozkładu (RDF)? W jaki sposób można ją obliczyć?</li> <li>17. Naszkicuj jak wygląda typowy wykres radialnej funkcji rozkładu (RDF) dla ciała stałego w fazie krystalicznej, dla cieczy i dla gazu. Jak zachowuje się radialna funkcja rozkładu wraz ze wzrostem <math>r</math>?</li> <li>18. Jakie dodatkowe informacje o układzie możemy otrzymać obliczywszy jego radialną funkcję rozkładu(RDF)? Jak wyznaczyć te informacje?</li> <li>19. Co to jest odchylenie średniokwadratowe (MSD) w symulacji metodą MD? W jaki sposób możemy je wyznaczyć? Jakie informacje niesie?</li> <li>20. Co to jest kąтова funkcja rozkładu? Naszkicuj jej typowy przebieg dla różnych układów.</li> <li>21. W jaki sposób w symulacji MD możemy wyznaczyć współczynnik samodyfuzji? Jaką informację niesie?</li> <li>22. Jaką rolę w symulacji metodą MD pełni potencjał? Jak jest związany z siłą działającą na <math>i</math>-ty atom? Podaj jego ogólną postać przyjmowaną w praktyce.</li> <li>23. Narysuj przebieg potencjału Lennarda-Jonesa. Jakim wzorem jest on dany? Wyjaśnij znaczenie symboli występujących we wzorze. Jakie układy dobrze opisuje ten potencjał?</li> <li>24. Jakim wzorem dany jest potencjał Lennarda-Jonesa? Jakie zjawiska fizyczne modeluje każdy z członów tego potencjału?</li> <li>25. Potencjał sztywnych kul, Borna-Mayera, harmoniczny i potencjał Morse'a opisz wybrane trzy spośród tych czterech potencjałów.</li> <li>26. Porównaj potencjały Stillinger-Webera i Suttona-Chena. Do jakich układów należałoby zastosować pierwszy, a do jakich drugi z nich?</li> <li>27. Scharakteryzuj krótko potencjał stosowany w programie AMBER. Jakie efekty modeluje każdy z członów tego potencjału?</li> <li>28. W jaki sposób obliczamy ciśnienie w symulacjach MD? Przedstaw skrócone wyprowadzenie.</li> <li>29. Opisz szczegółowo metodę Ewalda. Co to podejście ma na celu? W jakich układach je stosujemy?</li> <li>30. Na czym polega dynamika z więzami (constrained dynamics). Podaj przykłady kiedy warto byłoby ją zastosować.</li> <li>31. Krótko opisz podejście formalne oraz podejście SHAKE do realizacji dynamiki z więzami (constrained dynamics).</li> <li>32. Omów krótko termostat Berendsena i termostat Andersena.</li> <li>33. Opisz ogólne sposoby utrzymania stałej temperatury w symulacji metodą MD.</li> <li>34. Na czym polegają modele powłokowe (shell models)? Kiedy są stosowane? Wyjaśnij w skrócie czym różni się model statyczny Cochra od modelu dynamicznego Finchama?</li> </ol>
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy