Program wykładu
Symulacje komputerowe w fizyce

1. Metoda Dynamiki Molekularnej
   (a) Numeryczne całkowanie równań różniczkowych.Metody Rungego-Kutty, Verleta i predictor-corrector.
   (b) Warunki początkowe i brzegowe.
   (c) Potencjały fenomenologiczne.
   (d) Obliczanie wielkości fizycznych i funkcji korelacyjnych.
   (e) Metoda dynamiki molekularnej w zespole mikrokanonicznym, przykład:gaz Lenarda-Jonesa.
   (f) Dynamika molekularna sztywnych kul i dysków.
   (g) Metoda dynamiki molekularnej w zespole kanonicznym, metoda Nosego- Hoovera, przykład: oscylator harmoniczny w kąpieli cieplnej.
   (h) Metoda dynamiki molekularnej w zespole izobaryczno-izotermicznym.
2. Metoda Monte Carlo
   (a) Próbkowanie proste, tendencyjne i ważone, przykłady: błądzenie losowe, ruch losowy bez samoprzecięć, ruch losowy na fraktalach. Obliczanie wartości średnich i błędów statystycznych.
   (b) Zależność wyników symulacji od rozmiarów układu, przykład: wyznaczanie progu perkolacji.
   (c) MC w zespole kanonicznym, algorytm Metropolisa, błędy statystyczne, przykład: 2-wymiarowy model Isinga.
   (d) Spowolnienie krytyczne. Algorytmy Swedsena-Wanga i Wolfa.
   (e) MC w wielkim zespole kanonicznym.
   (f) MC w zespole mikrokanonicznym, algorytm Creutza.
   (g) MC w zespole izobaryczno-izotermicznym,
   (h) Zastosowanie MC w optymalizacji - metoda wyżarzania komputerowego (simulated annealing), przykład: problem komiwojażera.
   (i) Kinetyczne Monte Carlo.

Literatura:

1. D.W.Heermann, *Podstawy symulacji komputerowych w fizyce*, WNT 1997.
2. K.Binder, D.W.Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer 1988.
3. W.H.Press et al, *Numerical Recipes in C*, Cambridge 1992.

Czesław Oleksy