



Indywidualne praktyki laboratoryjne dla licealistów — semestr letni 2020/2021

| 1. Podstawowe informacje | | IPL/2021L/01 |
|---|---|---|
| Temat | Symulacje komputerowe jako narzędzie pracy fizyka | |
| Tutor | dr inż. Tomasz Pietrzak tomasz.pietrzak@pw.edu.pl | |
| Miejsce realizacji | ZDALNIE | |
| Preferowane godziny realizacji | 10 potkań po 3 h lekcyjne, czwartki, 15:30 – 18:00 | |
| Tematyka | <input checked="" type="checkbox"/> <i>Materiały i nanostruktury</i> <input type="checkbox"/> <i>Fizyka medyczna</i> | <input type="checkbox"/> <i>Fizyka jądrowa / cząstek elementarnych</i> <input type="checkbox"/> <i>Optyka / optoelektronika / fotonika</i> |
| 2. Ramowy harmonogram praktyk | | |
| <ol style="list-style-type: none">1. Przygotowanie środowiska pracy oraz wprowadzenie do zagadnienia (3 h)2. Modelowanie drgań prostych układów 1D oraz 2D (6 h)3. Modelowanie przepływu ciepła w obiektach 2D (3 h)4. Modelowanie ruchu ciał niebieskich w polu grawitacyjnym (6 h)5. Modelowanie kryształu argonu (6 h)6. Wykonywanie symulacji metodą dynamiki molekularnej przy użyciu środowiska LAMMPS (6 h) | | |
| 3. Opis tematu | | |

Wraz ze wzrostem mocy obliczeniowej komputerów i konstrukcji coraz potężniejszych superkomputerów rosną możliwości zastosowania technik numerycznych w modelowaniu zachowania układów rzeczywistych. Przedmiotem zainteresowania fizyków komputerowych, astrofizyków czy inżynierów materiałowych może być bardzo wiele bytów, począwszy na obliczaniu trajektorii ciał niebieskich, przez zachowanie otaczających nas maszyn i urządzeń, a skończywszy na fascynującym świecie atomowym. Celem niniejszych praktyk będzie zapoznanie uczestników z wybranymi aspektami metod symulacji komputerowych:

Modelowanie drgań układów 1D i 2D

Opisywanie układów bardzo wielu ciał jest niezwykle istotnym zagadnieniem fizyki i często może być realizowane analitycznie przy zastosowaniu pewnych warunków (tzw. warunków brzegowych, np. periodyczności) lub przybliżeń. Bez wnikania w niekiedy skomplikowane metody fizyki układów wielociałowych, spróbujemy zamodelować drgania jedno- i dwuwymiarowej siatki obiektów połączonych oddziaływaniami sprężystymi.

Transport ciepła w metalach

Niezwykle ważnym zagadnieniem w pracy wielu inżynierów projektujących wielkie lub skomplikowane konstrukcje (np. silniki samolotów czy duże budowle) jest wyznaczanie rozkładu i propagacji ciepła, naprężeń, drgań itd. W modelowaniu i przewidywaniu zachowań zaprojektowanych obiektów pomagają symulacje komputerowe. Aby poznać smak tego zagadnienia, zajmiemy się symulacją transportu ciepła (czyli – innymi słowy mówiąc – rozkładu temperatury) w prostych obiektach, dających przedsmak „prawdziwych” symulacji komputerowych stosowanych w przemyśle.

Tor obiektów kosmicznych

Przewidywanie torów, po których poruszają się miliardy obiektów w kosmosie – gwiazd, planet, księżyców, planetoid itd., jest niezwykle ważnym zadaniem astronomii. Umożliwia to nie tylko monitorowanie ruchu ciał niebieskich, których kolizja z Ziemią mogłaby mieć katastrofalne skutki dla naszej cywilizacji, ale także pozwala na planowanie wypraw kosmicznych: na orbitę ziemską, Księżyc, Marsa czy do innych planet Układu Słonecznego. Pokażemy, jak w prosty sposób można modelować ruch obiektów w zadanym polu grawitacyjnym i udamy się w fascynującą podróż w kosmos.

Symulacje ruchu atomów metodami dynamiki molekularnej (MD)

Przechodząc do mikroświata, metody tzw. dynamiki molekularnej potrafią w deterministyczny sposób wyliczać ruch poszczególnych atomów w próbkach odwzorowujących budowę prawdziwych materiałów, i na tej podstawie obliczać – a często przewidywać przed eksperymentalną syntezą i zbadaniem takich materiałów – ich właściwości fizycznych czy chemicznych. Zaczniemy od stosunkowo prostej symulacji kryształu argonu, a następnie zapoznamy się z profesjonalnym „kombajnem” używanym przez naukowców z całego świata do prowadzenia obliczeń metodami MD – LAMMPS.

Wymagania wstępne

Warsztat jest skierowany dla licealistów, którzy opanowali już dobrze podstawy języka C++, a chcieliby poznać jego praktyczne zastosowanie w wybranych zagadnieniach symulacji komputerowych z dziedziny nauk przyrodniczych. Warsztat nie jest warsztatem uczącym uczestników języka C++, ale pokazującym przykładowe

wykorzystanie go w konkretnych zastosowaniach. Dlatego uczestnicy warsztatu powinni mieć opanowany język do poziomu 4 (włącznie) kursu <http://cpp0x.pl/kursy/Kurs-C++/1> oraz znać podstawy programowania obiektowego (proste struktury i klasy). Będzie on przydatny nie tylko dla kandydatów na studia na wydziałach fizyki i informatyki, ale także energetyki czy inżynierii środowiska.

Uczestnicy muszą posiadać komputer PC. Do realizacji zadań wymagany będzie kompilator języka C++ z rodziny GCC pracujący w środowisku Linux. Z praktycznego punktu widzenia, obok „pełnej” instalacji Linuxa, wystarczające będzie środowisko Linux w maszynie wirtualnej (np. VirtualBox), a nawet „aplikacja” *Ubuntu* dostępna pod Windows 10 (najprostsze rozwiązanie). Środowisko zostanie skonfigurowane z pomocą tutora na pierwszym spotkaniu.