

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu: Metody obliczeniowe fizyki i techniki 1

Rok akademicki: 2016/2017 Kod: JFT-1-611-s Punkty ECTS: 4

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kierunek: Fizyka Techniczna Specjalność: —

Poziom studiów: Studia I stopnia Forma i tryb studiów: Stacjonarne

Język wykładowy: Polski Profil kształcenia: Ogólnoakademicki (A) Semestr: 6

Strona www: <http://galaxy.uci.agh.edu.pl/~bszafran/>

Osoba odpowiedzialna: prof. dr hab. inż. Szafran Bartłomiej (bszafran@agh.edu.pl)

Osoby prowadzące: prof. dr hab. inż. Szafran Bartłomiej (bszafran@agh.edu.pl)

Krótką charakterystyka modułu

Student poznaje metody różnicowe służące do rozwiązywania problemów fizyki klasycznej, w zastosowaniu do dynamiki Newtona, równań cząstkowych, oraz elementarne metody numeryczne.

Opis efektów kształcenia dla modułu zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Powiązania z EKK	Sposób weryfikacji efektów kształcenia (forma zaliczeń)
Wiedza			
M_W001	Student zna podstawowe metody dynamiki molekularnej.	FT1A_W02, FT1A_W03, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W002	Student zna podstawowe metody różnicowe rozwiązywania równań ruchu mechaniki klasycznej.	FT1A_W02, FT1A_W03, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W003	Student zna podstawowe schematy numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych typowych dla fizyki klasycznej (falowe, dyfuzji, adwekcji) w podejściu różnic skończonych.	FT1A_W02, FT1A_W03, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W004	Student zna podstawowe metody różnicowe obliczania pochodnych i całek funkcji jednej zmiennej.	FT1A_W02, FT1A_W03, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	Aktywność na zajęciach, Projekt, Sprawozdanie, Udział w dyskusji

Umiejętności			
M_U001	Student umie wykonać różniczkowanie i całkowanie numeryczne funkcji jednej zmiennej. Student umie numerycznie rozwiązać – za pomocą opracowanego przez siebie programu komputerowego – równania ruchu dla kilku cząstek klasycznych Student potrafi rozwiązywać numerycznie typowe równania cząstkowe (falowe, adwekcji-dyfuzji, Poissona)	FT1A_U11, FT1A_U08, FT1A_U04, FT1A_U03, FT1A_U02, FT1A_U01	Aktywność na zajęciach, Projekt, Sprawozdanie, Udział w dyskusji
Kompetencje społeczne			
M_K001	Student potrafi zaplanować realizację projektu oraz opisać w sposób klarowny i atrakcyjny osiągnięte rozwiązania.	FT1A_K09, FT1A_K03	Sprawozdanie, Aktywność na zajęciach, Projekt

Matryca efektów kształcenia w odniesieniu do form zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Forma zajęć										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Inne	E-learning
Wiedza												
M_W001	Student zna podstawowe metody dynamiki molekularnej.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W002	Student zna podstawowe metody różnicowe rozwiązywania równań ruchu mechaniki klasycznej.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W003	Student zna podstawowe schematy numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych typowych dla fizyki klasycznej (falowe, dyfuzji, adwekcji) w podejściu różnic skończonych.	+	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-
M_W004	Student zna podstawowe metody różnicowe obliczania pochodnych i całek funkcji jednej zmiennej.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Umiejętności												

M_U001	Student umie wykonać różniczkowanie i całkowanie numeryczne funkcji jednej zmiennej. Student umie numerycznie rozwiązać - za pomocą opracowanego przez siebie programu komputerowego - równania ruchu dla kilku cząstek klasycznych Student potrafi rozwiązywać numerycznie typowe równania cząstkowe (falowe, adwekcji-dyfuzji, Poissona)	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne												
M_K001	Student potrafi zaplanować realizację projektu oraz opisać w sposób klarowny i atrakcyjny osiągnięte rozwiązania.	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-

Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

- (1) różniczkowanie numeryczne
- (2) interpolacja wielomianowa
- (3) rozwiązywanie algebraicznych równań nieliniowych
- (3) dynamika Newtona w metodzie różnic skończonych:
 - (3a) schematy Eulera, trapezów, Rungego-Kutty, Adamsa
 - (3b) kontrola błędu i automatyczny dobór kroku czasowego, problemy sztywne
- (4) dynamika Newtona dla obiektów rozciągłych
 - (4a) schematy Verleta, rozwiązywanie równania falowego dla struny, drgania tłumione, wymuszone, rezonanse
 - (4b) opis numeryczny ciała miękkiego
- (5) problemy optymalizacji: (5a) metody gradientowe oraz (5b) metody Monte Carlo
 - algorytm Metropolis, symulowane wygrzewanie
 - (b) algorytmy genetyczne
- (6) Całkowanie numeryczne: kwadratury Newtona, Gaussa, całkowanie Monte Carlo
- (7) Model Isinga
- (8) Rozwiązywanie równania Poissona (7a) dokładne i iteracyjne metody rozwiązywania układów równań liniowych (7b) metody relaksacyjne (7c) metody wielosiatkowe
- (9) Problemy adwekcji i dyfuzji. Analiza von Neumanna. Kryterium CFL.
- (10) Rozwiązywanie równania mechaniki płynów nieściśliwych (a) przepływ potencjalny (b) przepływ cieczy lepkiej

Ćwiczenia projektowe

Student wykonuje w czasie semestru 7 projektów. Zajęcia projektowe odbywają się raz na dwa tygodnie. Studenci zaczynają pracować nad zadaniem w czasie zajęć. Zajęcia z n-tych zajęć muszą zostać zaliczone nie później niż na n+2 zajęciach.

Tematyka projektów

- (1) dynamika Newtona dla ciała punktowego w jednym wymiarze
- (2) rachunek z kontrolowanym krokiem czasowym w zastosowaniu do orbity ciała w

potencjale grawitacyjnym

(3) równanie struny, drgania wymuszone, rezonanse

(4) optymalizacja gradientowa oraz Monte Carlo

(5) rozwiązywanie równania Poissona metodą nadrelaksacji

(6) przepływ potencjalny

(7) przepływ lepki

Sposób obliczania oceny końcowej

Student przygotowuje 7 projektów na temat zadany przez prowadzącego.

Wykonanie projektu wymaga napisania programu komputerowego rozwiązującego problem oraz zebranie danych oraz opisanie wyników w formie sprawozdania.

Ocena końcowa jest obliczona jako średnia arytmetyczna z ocen z 6 najwyżej ocenionych projektów wykonanych przez studenta.

Wymagania wstępne i dodatkowe

- Znajomość podstaw rachunku różniczkowego
- Znajomość podstaw teorii równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych
- Znajomość praw ruchu mechaniki klasycznej

Zalecana literatura i pomoce naukowe

1.J. Adamowski, „Metody obliczeniowe fizyki i techniki I”, www.fis.agh.edu.pl/~adamowski/dydaktyka

2.D. Potter „Metody obliczeniowe fizyki” (PWN, Warszawa, 1977)

3.D.W. Heermann „Podstawy symulacji komputerowych w fizyce” (WN-T, Warszawa, 1997)

4.Tao Pang „Metody obliczeniowe w fizyce” (PWN, Warszawa, 2001)

5.S.E. Koonin, D. Meredith „Computational Physics” (Addison-Wesley, Reading, 1990)

Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu

1.

Nanodevice for High Precision Readout of Electron Spin

By: Szumniak, P.; Bednarek, S.; Szafran, B.; et al.

Conference: 39th Conference on the Physics of Semiconductors Location: Jaszowied Int Sch, Krynica-Zdroj, POLAND Date: JUN 19-24, 2010

Sponsor(s): Inst Phys Polish Acad Sci; Univ Warsaw, Fac Phys; Inst High Pressure Phys Polish Acad Sci

ACTA PHYSICA POLONICA A Volume: 119 Issue: 5 Pages: 651-653 Published: MAY 2011

2.

Spin accumulation and spin read out without magnetic field

By: Bednarek, S.; Szumniak, P.; Szafran, B.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 82 Issue: 23 Article Number: 235319 Published: DEC 16 2010

3.

Selective suppression of Dresselhaus or Rashba spin-orbit coupling effects by the Zeeman interaction in quantum dots

By: Szafran, B.; Nowak, M. P.; Bednarek, S.; et al.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 79 Issue: 23 Article Number: 235303 Published: JUN 2009

4.

Magnetic-Field Asymmetry of Electron Wave Packet Transmission in Bent Channels Capacitively Coupled to a Metal Gate

By: Kalina, R.; Szafran, B.; Bednarek, S.; et al.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 102 Issue: 6 Article Number: 066807 Published: FEB 13 2009

5.

Gated combo nanodevice for sequential operations on single electron spin

By: Bednarek, S.; Szafran, B.

NANOTECHNOLOGY Volume: 20 Issue: 6 Article Number: 065402 Published: FEB 11 2009

6.

Spin Rotations Induced by an Electron Running in Closed Trajectories in Gated Semiconductor

Nanodevices

By: Bednarek, S.; Szafran, B.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 101 Issue: 21 Article Number: 216805 Published: NOV 21 2008

7.

Induced quantum dots and wires: Electron storage and delivery

By: Bednarek, S.; Szafran, B.; Dudek, R. J.; et al.

PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 100 Issue: 12 Article Number: 126805 Published: MAR 28 2008

8.

Quantum dot defined in a two-dimensional electron gas at a n-AlGaAs/GaAs heterojunction: Simulation of electrostatic potential and charging properties

By: Bednarek, S.; Lis, K.; Szafran, B.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 77 Issue: 11 Article Number: 115320 Published: MAR 2008

9.

Exciton spectra in vertical stacks of triple and quadruple quantum dots in an electric field

By: Szafran, B.; Barczyk, E.; Peeters, F. M.; et al.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 77 Issue: 11 Article Number: 115441 Published: MAR 2008

10.

Electron correlations in charge coupled vertically stacked quantum rings

By: Szafran, B.; Bednarek, S.; Dudziak, M.

PHYSICAL REVIEW B Volume: 75 Issue: 23 Article Number: 235323 Published: JUN 2007

Informacje dodatkowe

Sposób i tryb wyrównania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach

Projekt: Nieobecność na zajęciach wymaga od studenta samodzielnego opanowania przerabianego na tych zajęciach materiału. Student, który bez usprawiedliwienia opuścił więcej niż 3 zajęcia i jego cząstkowe wyniki w nauce były negatywne może zostać pozbawiony przez prowadzącego zajęcia możliwości wyrównania zaległości.

Obecność na wykładzie: zgodnie z Regulaminem Studiów AGH.

Zasady zaliczania zajęć

Projekt: Podstawowym terminem uzyskania zaliczenia jest koniec zajęć w danym semestrze.

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Wykonanie projektu	50 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	14 godz
Udział w wykładach	30 godz
Przygotowanie sprawozdania, pracy pisemnej, prezentacji, itp.	10 godz
Udział w ćwiczeniach projektowych	15 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	119 godz
Punkty ECTS za moduł	4 ECTS