



Nazwa modułu: Metody obliczeniowe fizyki i techniki 1

Rok akademicki: 2017/2018 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_W03, FT1A_W02, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W002	Student zna podstawowe metody różnicowe rozwiązywania równań ruchu mechaniki klasycznej.	FT1A_W03, FT1A_W02, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W003	Student zna podstawowe metody całkowania metodami Monte Carlo	FT1A_W03, FT1A_W02, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	
M_W004	Student zna podstawowe metody różnicowe obliczania pochodnych i całek funkcji jednej zmiennej.	FT1A_W03, FT1A_W02, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W06	Udział w dyskusji, Sprawozdanie, Projekt, Aktywność na zajęciach
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_U01, FT1A_U02	Udział w dyskusji, Sprawozdanie, Projekt, Aktywność na zajęciach
Kompetencje społeczne			
M_K001	Student potrafi konstruktywnie współpracować w ramach zespołu w celu wspólnego opracowania programów do numerycznego rozwiązywania problemów	FT1A_K09, FT1A_K01	Projekt, Aktywność na zajęciach, Sprawozdanie

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 metody całkowania metodami Monte Carlo	+	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-
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 konstruktywnie współpracować w ramach zespołu w celu wspólnego opracowania programów do numerycznego rozwiązywania problemów	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-

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 rozciągliwych
 - (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 numeryczne
- (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. Za sprawozdanie złożone na następnych zajęciach można dostać do 100% punktów. Po każdym zajęciach maksymalna ocena spada o 20%.

Tematyka projektów

- (1) dynamika Newtona dla ciała punkowego 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