Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki

Karta przedmiotu

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2019/2020

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma sudiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: II

Specjalności: Modelowanie komputerowe

1 Informacje o przedmiocie

Nazwa przedmiotu	Symulacje komputerowe w fizyce
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	
Kod przedmiotu	WIMiF FT oIIS D1 19/20
Kategoria przedmiotu	Przedmioty specjalnościowe
Liczba punktów ECTS	7.00
Semestry	1 2

2 Rodzaj zajęć, liczba godzin w planie studiów

Semestr	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Laboratorium komputerowe	Seminarium	Projekt
1	15	0	0	45	0	0
2	15	0	0	30	0	0

3 Cele przedmiotu

Cel 1 Wprowadzenie do metod symulacji klasycznych zjawisk fizycznych.

Cel 2 Wprowadzenie do metod symulacji zjawisk kwantowych.

Cel 3 Zapoznanie z metodami Monte Carlo w fizyce statystycznej.

Cel 4 Zapoznanie z metodami dynamiki molekularnej.

4 Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i innych kompetencji

1 Znajomość fizyki klasycznej, kwantowej i statystycznej.

2 Umiejętność programowania w C/C++.

5 Efekty kształcenia

EK1 Wiedza Znajomość metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych w fizyce klasycznej.

EK2 Wiedza Znajomość metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych w fizyce kwantowej.

EK3 Wiedza Znajomość metod Monte Carlo.

EK4 Wiedza Znajomość metod dynamiki molekularnej.

EK5 Umiejętności Umiejętność numerycznego rozwiązania równań różniczkowych w fizyce klasycznej.

EK6 Umiejętności Umiejętność numerycznego rozwiązania równań różniczkowych w fizyce kwantowej.

EK7 Umiejętności Umiejętność pisania programów symulujących zjawiska fizyczne z wykorzystaniem metod Monte Carlo.

EK8 Umiejętności Umiejętność pisania programów symulujących zjawiska fizyczne z wykorzystaniem metod dynamiki molekularnej.

EK9 Umiejętności Umiejętność pisania programów z wykorzystaniem biblioteki multimedialnej.

EK10 Kompetencje społeczne Umiejętność pracy w zespole piszącym oprogramowanie.

6 Treści programowe

Wykład		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W1	Numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych w fizyce: numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych zwyczajnych, symulacja cząsteczki w polu grawitacyjnym, symulacja cząsteczki w polu elektromagnetycznym, numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych, równania różniczkowe cząstkowe w fizyce, metody numeryczne dla równań adwekcji, dyfuzji, Laplace'a, Poissona i falowego, numeryczne rozwiązywanie równania Schrödingera, dyskretyzacja równania Schrödingera w pudle potencjału i kwantowego oscylatora harmonicznego.	10

Wykład		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W2	Metoda Monte Carlo: historia metody Monte Carlo, całkowanie Monte Carlo w fizyce statystycznej, importance sampling, algorytm Monte Carlo dla zespołu kanonicznego, modele sieciowe, model Isinga bez pola i z polem w 1D i 2D, algorytm Metropolisa, model XY, przejście Kosterlitza-Thoulessa, model gazu na sieci i lattice Boltzmann - model gazu i cieczy, modele ciekłokrystaliczne Onsagera, Maiera-Saupe, Landaua, teoria Landaua-de Gennesa, modele agregacji i adsorpcji.	10
W3	Metoda dynamiki molekularnej: mechanika hamiltona, potencjały, oddziaływania międzycząsteczkowe, siły van der Waalsa, modele gazów rzeczywistych, metody symplektyczne całkowania równań ruchu, obliczanie makroskopowych obserwabli na podstawie symulacji, metoda ab initio dynamika Langevina i Browna, loty Levy'ego, symulacja aktywnej materii.	10

Laboratorium komputerowe		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
K1	Wprowadzenie do środowiska programistycznego i bibliotek multimedialnych.	3
K2	Symulacja cząsteczek w polach: grawitacyjnym i elektromagnetycznym.	8
K3	Rozwiązywanie zagadnień zadanych równaniami adwekcji, dyfuzji, Laplace'a, Poissona i falowym	8
K4	Numeryczne rozwiązanie równania Schrödingera w pudle potencjału oraz w polu potencjału harmonicznego.	6
K5	Symulacja modelu Isinga w 1D i 2D bez pola i z polem zewnętrznym.	8
K6	Model XY.	6
K7	Modele ciekłych kryształów.	10
K8	Modelowanie procesów agregacji i adsorpcji.	6
K9	Symulacja cząsteczek oddziałujących wybranym potencjałem. Obliczanie obserwabli na podstawie symulacji.	12
K10	Symulacja ruchów Browna, lotów Levy'ego i aktywnej materii.	8

7 Narzędzia dydaktyczne

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

N4 Konsultacje

N5 Komputer wyposażony w kompilator C/C++ wraz z bibliotekami multimedialnymi

N6 System algebry komputerowej

8 Obciążenie pracą studenta

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	105
Konsultacje przedmiotowe	15
Egzaminy i zaliczenia w sesji	10
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	20
Opracowanie wyników	30
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	30
Sumaryczna liczba godzin dla przedmiotu wynikająca z całego nakładu pracy studenta	**210**
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla przedmiotu	7.00

9 Sposoby oceny

Ocena formująca

F1 Sprawozdanie - przygotowanie sprawozdania z ćwiczeń laboratoryjnych

F2 Kolokwia - sprawdzenie pracy na zajęciach

F3 Egzamin końcowy

Ocena podsumowująca

P1 Semestr 1: 1/2 sprawozdanie + 1/2 kolokwia

P2 Semestr 2: 5/14 sprawozdanie + 5/14 kolokwia + 2/7 egzamin

Warunki zaliczenia przedmiotu

W1 Warunkiem podejścia do egzaminu jest zaliczenie laboratorium komputerowego

W2 Nie więcej niż 3 nieobecności (dotyczy każdego semestru z osobna)

Kryteria oceny

Efekt kształcenia 1	
Na ocenę 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
Efekt kształcenia 2	
Na ocenę 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
Efekt kształcenia 3	
Na ocenę 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
Efekt kształcenia 4	
Na ocenę 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
Efekt kształcenia 5	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
Efekt kształcenia 6	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.

Efekt kształcenia 7	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
Efekt kształcenia 8	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
Efekt kształcenia 9	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
Na ocenę 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
Na ocenę 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
Efekt kształcenia 10	
Na ocenę 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.

10 Macierz realizacji przedmiotu

Efekt kształcenia	Odniesienie danego efektu do szczegółowych efektów zdefiniowanych dla programu	Cele przedmiotu	Treści programowe	Narzędzia dydaktyczne	Sposoby oceny
EK1	K_W01b K_W02b K_W03	Cel 1	W1	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK2	K_W01b K_W02b K_W03	Cel 2	W1	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2

Efekt kształcenia	Odniesienie danego efektu do szczegółowych efektów zdefiniowanych dla programu	Cele przedmiotu	Treści programowe	Narzędzia dydaktyczne	Sposoby oceny
EK3	K_W01b K_W02b K_W03 K_W06 K_W07b K_W09b K_W10	Cel 3	W2	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK4	K_W01b K_W02b K_W03 K_W06 K_W07b K_W09b K_W10	Cel 3 Cel 4	W3	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK5	K_U04b K_U05b K_U07b K_U08b	Cel 1	K1 K2 K3	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK6	K_U04b K_U05b K_U07b K_U08b	Cel 2	K4	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK7	K_U04b K_U05b K_U07b K_U08b	Cel 3	K5 K6 K7 K8	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK8	K_U04b K_U05b K_U07b K_U08b	Cel 3 Cel 4	K9 K10	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK9	K_U04b K_U08b	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	K1 K2 K3 K4 K5 K6 K7 K8 K9 K10	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK10	K_K01 K_K03	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	K1 K2 K3 K4 K5 K6 K7 K8 K9 K10	N3 N4	F1 F2 P1 P2

11 Wykaz literatury

Literatura podstawowa

[1] A. D. Polyanin, V. F. Zaitsev — *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*, , 2003, CRC Press

[2] A. D. Polyanin — *Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists*, , 2001, Chapman and Hall/CRC

[3] D. P. Landau, K. Binder — *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, , 2009, Cambridge University Press

[4] D. Frenkel, B.Smit — *Understanding Molecular Simulation 2nd Edition*, , 2001, Academic Press

Literatura uzupełniająca

[1] A. Ralston, P. Rabinowitz — *A First Course in Numerical Analysis: Second Edition*, , 2001, Dover Publications

12 Informacje o nauczycielach akademickich

Osoba odpowiedzialna za kartę

dr inż. Paweł Karbowniczek (kontakt: `pkarbowniczek@pk.edu.pl`)

Osoby prowadzące przedmiot

1 dr inż. Paweł Karbowniczek (kontakt: `pkarbowniczek@pk.edu.pl`)

13 Zatwierdzenie karty przedmiotu do realizacji

(miejscowość, data) (odpowiedzialny za przedmiot) (dziekan)

Przyjmuję do realizacji (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

. . . . . .