

Wydział Podstawowych Problemów Techniki PWr***KARTA PRZEDMIOTU****Nazwa w języku polskim: Metody obliczeniowe fizyki**Nazwa w języku angielskim: Numerical methods of Physics**Kierunek studiów: Inżynieria kwantowa*Stopień studiów i forma: **I stopień, stacjonarna**Rodzaj przedmiotu: **Wybieralny**Kod przedmiotu: **INP001017WL**Grupa kursów: **NIE**

	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium projektowe	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	15		30		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	30		60		
Forma zaliczenia	Zaliczenie na ocenę		Zaliczenie na ocenę		
Liczba punktów ECTS	1		2		
Liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)	0		0		
Liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)	1		2		

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

Kompetencje wyniesione z kursów: podstaw mechaniki kwantowej i fizyki ciała stałego,
analizy matematycznej, algebry

CELE PRZEDMIOTU

C1. Zdobycie wiedzy dotyczącej standardowych i zaawansowanych algorytmów i metod obliczeniowych stosowanych w fizyce do numerycznego rozwiązywania zagadnienia własnego.

C2. Nabycie umiejętności rozumienia oraz samodzielnego posługiwania się wybranymi stabilnymi, efektywnymi metodami i algorytmami numerycznymi do rozwiązywania wybranych zagadnień własnych.

C3. Rozwijanie kompetencji społecznych polegających na umiejętności współpracy w grupie studenckiej i mającej na celu efektywne rozwiązywanie problemów lub realizację zadań. Utrwalanie poczucia odpowiedzialności, uczciwości i rzetelności w postępowaniu w środowisku akademickim i społeczeństwie.

*niepotrzebne skreślić

PRZEDMIOTOWE EFEKTY KSZTAŁCENIA

I. Z zakresu wiedzy:

PEK_W01 – posiada wiedzę o standardowych i zaawansowanych metodach i algorytmach obliczeniowych fizyki komputerowej stosowanych do rozwiązywania stacjonarnego równania Schrödingera; w szczególności ma wiedzę dotyczącą: a) zastosowania metody różnic skończonych do rozwiązywania jednowymiarowego stacjonarnego równania Schrödingera; b) dotyczącą metod numerycznych wyznaczania wybranych wartości i wektorów własnych trójdiagonalnej macierzy symetrycznej; c) metod numerycznego analizowania równania masy efektywnej; d) strategii oraz efektywnych i stabilnych metod numerycznego rozwiązywania zagadnienia własnego dla dowolnej macierzy symetrycznej (algorytmy: Jacobiego-Rutishausera, QR i QL, dziel i rządź (Divide and Conquer)).

PEK_W02 – posiada wiedzę o algorytmach: a) Householdera sprowadzania macierzy symetrycznej do postaci macierzy trójdiagonalnej; b) Lanczosa rozwiązywania zagadnienia własnego dla dowolnej macierzy symetrycznej.

PEK_W03 – ma wiedzę o zastosowaniu poznanych metod do analizowania czasowego równania Schrödingera oraz wybranych zagadnień z mechaniki kwantowej i fizyki ciała stałego.

II. Z zakresu umiejętności:

PEK_U01 – potrafi samodzielnie w formie pisemnej lub w wypowiedzi ustnej poprawnie i zwięźle przedstawić wiedzę zdefiniowaną PEK_W01- PEK_W03.

PEK_U02 – potrafi: a) sprowadzić jednowymiarowe równanie Schrödingera, z zadaną energią potencjalną, do postaci symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego; b) stosować algorytm Martina-Deana do numerycznego obliczania wybranych wartości własnych trójdiagonalnej macierzy symetrycznej; c) stosować efektywne algorytmy do numerycznego wyznaczania wybranych wektorów własnych trójdiagonalnej macierzy symetrycznej.

PEK_U03 – potrafi: a) analizować numerycznie równanie masy efektywnej; b) stosować algorytmy: a) Jacobiego-Rutishausera; b) niewymiernego i wymiernego QR; c) niejawnego QR; d) dziel i rządź (Divide and Conquer) do obliczania wszystkich wartości i wektorów własnych symetrycznej macierzy trójdiagonalnej.

PEK_U04 – potrafi stosować algorytmy Householdera i Lanczosa do rozwiązywania zagadnienie własnego z macierzą symetryczną dla wybranych zagadnień z zakresu fizyki kwantowej i fizyki ciała stałego.

III. Rozwinięcie kompetencji społecznych w zakresie:

PEK_K01 – samodzielnego wyszukiwania wiedzy, krytycznego analizowania pozyskiwanych informacji.

PEK_K02 – rozumienia konieczności samooceny i samokształcenia się oraz rozwijania umiejętności radzenia sobie z popełnionymi błędami lub niepowodzeniami.

PEK_K03 – doskonalenia metod wyboru optymalnej strategii realizacji zadań i celów.

PEK_K04 – przestrzegania obyczajów i zasad obowiązujących w środowisku akademickim, w tym postępowania zgodnego z zasadami etycznymi i respektowanie obowiązującego prawa ze

szczególnym uwzględnieniem ochrony własności intelektualnej i praw autorskich.

TREŚCI PROGRAMOWE		
Forma z a j ę ć — w y k ł a d		Liczba godzin
W.1.-2.	<i>Sprawy organizacyjne. Przegląd zaawansowanych metod numerycznych rozwiązywania równania Schrödingera.</i>	2
W. 3.	<i>Równanie Schrödingera jako algebraiczne zagadnienie własne.</i>	1
W. 4.-5.	<i>Zagadnienie własne dla trójdzielnej macierzy symetry</i>	2

	<i>cznej.</i>	
W. 6.	<i>Równanie masy efektywnej.</i>	1
W. 7.-9.	<i>Algorytmy rozwiązywania symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego macierzy trójdzielnej: a) algorytmu Rutishausera; b) niewymierne algorytmy QR i QL; c) wymierne algorytmy QR i QL; d) niejawnie algorytmy QR i QL.</i>	3
W. 10.	<i>o algorytm dziel i rządź (Divide and Conquer)</i>	1
W. 11.-12.	<i>Metoda Lanczos a.</i>	2
W. 13.-15	<i>Zastosowania metod numerycznych w fizyce i fizyce ciała stałego.</i>	3
	Suma godzin	15

Forma zajęć – laboratorium projektowe	Liczba godzin	
L.1	Sprawy organizacyjne. Rozwiązywanie zadań z zakresu liniowej algebry liniowej dotyczących	2

	aproksymacji pochodnych za pomocą różnic skończonych oraz zagadnienia własnego dla macierzy symetrycznej	
L. 2-4	Realizacja projektu pt. <i>Wektory i wartości własne kwantowego oscylatora harmonicznego</i>	6
L. 5-8	Realizacja projektu pt. <i>Wektory i wartości własne jednowymiarowego równania Schroedingera w zadanym analitycznie potencjale</i>	8
L. 9-11	Realizacja projektu pt. <i>Analiza numeryczna równania masy efektywnej dla zadanej heterostruktury półprzewodnikowej</i>	6
L. 12-15	Realizacja projektu pt. <i>Wektory i wartości własne dowolnej symetrycznej macierzy</i>	6
	Suma godzin	30

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

1. Wykład tradycyjny z wykorzystaniem transparencji i slajdów.
 2. Praca własna: opracowanie kilku esejów
 2. Laboratorium komputerowe – samodzielna realizacja (programowanie) kilku projektów obliczeniowych
 4. Praca własna – samodzielne pisemne opracowanie projektów obliczeniowych
- Praca własna – samodzielne studia do zredagowania esejów

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW KSZTAŁCENIA

Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu kształcenia	Sposób oceny osiągnięcia efektu kształcenia
		Ocena opracowanych esejów

F1		
F2		Ocena jakości projektów obliczeniowych
P = F1+F2		
LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA		
<u>LITERATURA PODSTAWOWA</u>		
<p>[1] W. Salejda, M.H. Tyc, M. Just, <i>Metody algebraiczne rozwiązywania równania Schrödingera</i>, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002; podręcznik dostępny pod adresem</p> <p>http://www.if.pwr.wroc.pl/~wsalejda/AMRRS%20STJ.pdf</p> <p>[2] C.D. Mayer, <i>Matrix Analysis and Applied Linear Algebra</i>, SIAM 2000.</p> <p>[3] J. Demmel, <i>Applied Numerical Linear Algebra</i>, SIAM 1997.</p> <p>[4] G.W. Stuard, <i>Matrix Algorithms, vol. II: Eigensystems</i>, SIAM 2001.</p> <p>[5] M.T. Heath, <i>SCIENTIFIC COMPUTING, An Introductory Survey</i>, The McGraw-Hill Companies 1997.</p>		
LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA W JĘZYKU ANGIELSKIM		
<p>[1] J. Wilkinson, <i>Algebraic Symmetric Problems</i>, Clarendon Press, Oxford 1965.</p> <p>[2] J. Wilkinson, C. Reinsch (red.), <i>Handbook for Automatic Computations, t. 2, Linear Algebra</i>, Springer-Verlag, Heidelberg 1971.</p> <p>[3] F.S. Acton, <i>Numerical Methods that Work</i>, The Mathematical Association of America, Washington 1990.</p> <p>[4] B.N. Parlett, <i>The Symmetric Eigenvalue Problem</i>, Prentice-Hall, New York 1980;</p> <p>[5] I.S. Dhillon, <i>A New $O(n^2)$ Algorithm for the Symmetric Tridiagonal Eigenvalue/Eigenvector Problem</i>, Phd Thesis, University of California, Berkeley 1997; http://www.cs.utexas.edu/users/inderjit/; I. S. Dhillon, B.N. Parlett, <i>Orthogonal eigenvectors and relative gaps</i>, http://www.cs.utexas.edu/users/inderjit/.</p>		
OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIE, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)		
Włodzimierz Salejda, 71 320 20 20; wlodzimierz.salejda@pwr.edu.pl		

Poniższa tabela zostanie uzupełniona po otrzymaniu KEKów

MACIERZ POWIĄZANIA EFEKTÓW KSZTAŁCENIA DLA PRZEDMIOTU *Metody obliczeniowe fizyki* Z EFEKTAMI KSZTAŁCENIA NA KIERUNKU *Inżynieria kwantowa*

Przedmiotowy efekt kształcenia	Odniesienie przedmiotowego efektu do efektów kształcenia zdefiniowanych dla kierunku studiów i specjalności	Cele przedmiotu	Treści programowe	Numer narzędzia dydaktycznego
PEK_W01,PEK_W02	K1IBM_W02	C1.1	W. 1	1,7
PEK_W03,PEK_W04	K1IBM_W02	C1.1	W. 2-4	1,7
PEK_W05	K1IBM_W02	C1.1	W. 4-6	1,7
PEK_W06,PEK_W07	K1IBM_W02	C1.1	W. 6-9	1,7
PEK_W08	K1IBM_W02	C1.1	W. 10,11	1,7
<i>PEK_W09,PEK_W10</i>	K1IBM_W02	C1.1	<i>samodzielnie</i>	7
PEK_W11,PEK_W12	K1IBM_W02	C1.2	W. 11-14	1,7
PEK_W13	K1IBM_W02	C1.3	W. 14-17	1,7
PEK_W14, PEK_W15, PEK_W16	K1IBM_W02	C1.4, C1.5	W. 18-21	1,7
PEK_W17	K1IBM_W02	C1.6	W. 21-23	1,7
PEK_U01, PEK_U02, PEK_U03	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	Ćw. 1.	2-7
PEK_U04,	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	Ćw.2, 3.	2-7
PEK_U05, PEK_U06	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	Ćw. 4, 5.	2-7
PEK_U07	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	Ćw. 5, 6.	2-7
PEK_U08	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	Ćw. 7, 8.	2-7
<i>PEK_U09, PEK_U10</i>	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.1	<i>samodzielnie</i>	6,7
PEK_U11	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.2	Ćw. 8, 9.	2-7
PEK_U12	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.2	Ćw. 10, 11.	2-7
PEK_U13	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.3	Ćw. 11, 12.	2-7
PEK_U14, PEK_U15	K1IBM_U07, K1IBM_U9, K1IBM_U22	C2.4	Ćw. 13.	2-7
PEK_U16	K1IBM_U07, K1IBM_U9,	C2.5	Ćw. 14.	2-7

	K11BM_U22			
PEK_U17	K11BM_U07, K11BM_U9, K11BM_U22	C2.6	Ćw. 14, 15.	2-7
PEK_K01	K11BM_K02 K11BM_K06	C3.	W. 1-23, Ćw. 1-15	1-7
PEK_K02	K11BM_K03 K11BM_K06	C3.	W. 1-23, Ćw. 1-15	2-7
PEK_K03	K11BM_K02	C3.	W. 1-23, Ćw. 1-15	1-7
PEK_K04	K11BM_K03	C3.	W. 1-23, Ćw. 1-15	2-7
PEK_K05	K11BM_K04	C3.	W. 1-23, Ćw. 1-15	1-7

Autor: dr hab. inż., prof. PWr Włodzimierz Salejda

Wrocław, 15 lutego 2016