

Wydział Podstawowych Problemów Techniki PWr
KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa w języku polskim: **Metody numeryczne w fizyce**
 Nazwa w języku angielskim: **Numerical Methods in Physics**
 Kierunek studiów: **Fizyka techniczna**
 Specjalność: **Nanoinżynieria, Fotonika**
 Stopień studiów i forma: **II stopień, stacjonarna**
 Rodzaj przedmiotu: **Wybieralny**
 Kod przedmiotu: **FZP003049W, FZP003049C, FZP003049L**
 Grupa kursów: **NIE**

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

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

Kompetencje wyniesione z kursów: mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego, analizy matematycznej, algebry, pakietów matematycznych.

CELE PRZEDMIOTU

- C1. Zdobycie wiedzy dotyczącej zaawansowanych algorytmów i metod obliczeniowych stosowanych w fizyce do numerycznego rozwiązywania zagadnienia własnego.
- C2. Nabycie umiejętności rozumienia oraz samodzielnego posługiwania się stabilnymi, efektywnymi metodami i algorytmami numerycznymi do rozwiązywania wybranych zagadnień własnych.
- C3. Rozwijanie kompetencji społecznych w tym zrozumienie potrzeby ciągłego kształcenia się oraz umiejętności: (a) inspirowania i organizowania procesu kształcenia się innych, (b) pracy w grupie, (c) myślenia i postępowania w sposób kreatywny, (d) jasnego określania priorytetów prowadzących do realizacji zadań.

*niepotrzebne skreślić

PRZEDMIOTOWE EFEKTY KSZTAŁCENIA

Po zaliczeniu przedmiotu student

w zakresie wiedzy:

PEK_W01 – ma ogólną wiedzę o zaawansowanych metodach i algorytmach numerycznych stosowanych do rozwiązywania stacjonarnego równania Schrödingera.

PEK_W02 – ma wiedzę nt. a) sprowadzenia jednowymiarowego stacjonarnego równania Schrödingera do postaci symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego z macierzą pasmową, b) numerycznych metod wyznaczania wybranych wartości i wektorów własnych symetrycznych macierzy pasmowych (algorytm Martina-Deana), c) numerycznych metod stosowanych do rozwiązywania i analizowania równania masy efektywnej.

PEK_W03 – ma wiedzę nt. obliczeniowej strategii oraz efektywnych i stabilnych metod numerycznego rozwiązywania zagadnienia własnego dla dowolnej macierzy symetrycznej; w szczególności zna: algorytm Rutishausera stosowany w metodzie Jacobiego, wymierne i niewymierne algorytmy QR/QL, metodę dziel i rządź (Divide and Conquer), algorytm Householdera oraz Lanczosa.

w zakresie 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 wyprowadzić wybrane algorytmy numeryczne zdefiniowane PEK_W01-PEK_W03.

PEK_U03 – potrafi – stosując metody i algorytmy zdefiniowane PEK_W02 i PEK_W03 analizować i rozwiązywać wybrane zagadnienia mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i nanoinżynierii.

w zakresie kompetencji społecznych:

PEK_K01 – rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób (K2FTE_K01)

PEK_K02 – potrafi współdziałać i pracować w grupie, przyjmując w niej różne role, także kierownicze (K2FTE_K03)

PEK_K03 – potrafi myśleć i działać w sposób kreatywny oraz określać priorytety służące realizacji określonego zadania (K2FTE_K05)

TREŚCI PROGRAMOWE		
Forma zajęć – wykład		Liczba godzin
W.1. – 2.	Sprawy organizacyjne. Przegląd zaawansowanych metod numerycznych rozwiązywania równania Schrödingera	2
W. 3.	Równanie Schrödingera jako algebraiczne zagadnienie własne z symetryczną macierzą pasmową	1
W. 4. – 5.	Zagadnienie własne dla pasmowej macierzy symetrycznej – numeryczne metody analizowania i rozwiązywania	2
W. 6.	Równanie masy efektywnej – numeryczne metody analizowania i rozwiązywania	1
W. 7. – 9.	Algorytmy rozwiązywania symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego z macierzą pasmową – niewymierne i wymierne algorytmy QR/QL	3

W. 10.	Algorytm dziel i rządź (Divide and Conquer) numerycznego rozwiązywania symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego z macierzą pasmową	1
W. 11.,12.	Algorytmy rozwiązywania symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego z macierzą symetryczną – metoda Jacobiego (algorytm Rutishausera), Householdera i Lanczosa	2
W. 13.–15.	Zastosowania metod numerycznych do analizowania i rozwiązywania wybranych problemów fizyki, mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i nanoinżynierii.	3
	Suma godzin	15

Forma zajęć – ćwiczenia		Liczba godzin
Ćw. 1,2,3	Sprawy organizacyjne. Rozwiązywanie zadań z zakresu algebry liniowej: przypomnienie podstawowych pojęć. (PEK_U02, PEK_U03, PEK_K02)	3
Ćw.4,5,6	Sprowadzanie równania Schrödingera do postaci bezwymiarowej (dla ogólnej i wybranej postaci potencjału) jego dyskretyzacja, sformułowanie symetrycznego algebraicznego zagadnienia własnego. (PEK_U02, PEK_K02)	3
Ćw. 7	Dowód twierdzenia Sylwestera o bezwładności macierzy (PEK_U02, PEK_K02).	1
Ćw. 8, 9	Wyprowadzenie algorytmu Martina-Deana do obliczania wybranych wartości własnych macierzy trójprzekątnej i pięcioprzekątnej (PEK_U02, PEK_K02, PEK_K03)	2
Ćw. 10	Wyprowadzenie algorytmu DWSZ do numerycznego wyznaczania wybranych wektorów własnych trójprzekątnej macierzy symetrycznej (PEK_U02, PEK_K02)	1
Ćw.11,12	Wyprowadzenie postaci numerycznych algorytmów QR, QL (PEK_U02, PEK_K02)	2
Ćw. 13	Dowód podstawowych twierdzeń na których oparty jest algorytm dziel i rządź (Divide and Conquer) (PEK_U02, PEK_K02)	1
Ćw. 14	Kolokwium zaliczeniowe (PEK_U02)	1
Ćw. 15	Kolokwium zaliczeniowe (poprawa) (PEK_U02)	1
	Suma godzin	15
Forma zajęć – laboratorium komputerowe		Liczba godzin
Lab. 1	Sprawy organizacyjne.	1
Lab. 1, 2	Środowisko obliczeń algebraicznych – MATLAB – repetytorium. (PEK_U03, PEK_K01, PEK_K02)	3
Lab. 3, 4	Implementacje algorytmu Martina-Deana wyznaczania wartości własnych symetrycznej rzeczywistej macierzy trójdiagonalnej. (PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03)	4
Lab. 5, 6	Implementacje metody DWSZ obliczenia wektorów własnych macierzy trójdiagonalnej. (PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03)	4

Lab. 7, 8	Numeryczne rozwiązywanie równań Schrödingera dla nieskończonej studni prostokątnej oraz oscylatora harmonicznego. (PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03)	4
Lab. 9, 10, 11	Weryfikacja dokładności algorytmów Martina-Deana i DWSZ. (PEK_U03, PEK_K01, PEK_K02, PEK_K03)	5
Lab.11, 12	Numeryczna analiza wybranego zagadnienia kwantowomechanicznego. (PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03)	3
Lab.13, 14, 15	Zagadnienie własne dla macierzy symetrycznych – metody Householdera i Lanczosa. (PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03)	6
	Suma godzin	30

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1. Wykład tradycyjny z wykorzystaniem transparencji i slajdów
 N2. Ćwiczenia rachunkowe – studenci przedstawiają własne rozwiązania zadań
 N3. Laboratorium komputerowe – studenci realizują samodzielnie projekty numeryczne
 N4. Praca własna – przygotowanie do ćwiczeń i opracowywanie projektów
 N5. Praca własna – samodzielne studia i przygotowanie do ćw. rach. i zajęć lab.
 N6. Portfolio – praca własna – student w trakcie semestru gromadzi materiały: esej, notatki z wykładów, własne rozwiązania zadań z ćw. rach, sprawozdania z lab. komputerowego oraz inne materiały pomocnicze.

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW KSZTAŁCENIA

Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu kształcenia	Sposób oceny osiągnięcia efektu kształcenia
F1	PEK_W01–PEK_W03, PEK_U01	Ocena eseju.
F2	PEK_U02, PEK_U03, PEK_K02, PEK_K03	Kolokwium zaliczeniowe, aktywność w trakcie ćw. rach.
F3	PEK_U03, PEK_K01, PEK_K02, PEK_K03	Ocena portfolio.
$P = 0.2 * F1 + 0.2 * F2 + 0.6 * F3$		

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] W. Salejda, M.H. Tyc, M. Just, *Metody algebraiczne rozwiązywania równania Schrödingera*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002; dostępna na stronie wykładowcy.
[2] C.D. Mayer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, SIAM 2000.
[3] J. Demmel, *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM 1997.
[4] G.W. Stuard, *Matrix Algorithms, vol. II: Eigensystems*, SIAM 2001.
[5] M.T. Heath, *SCIENTIFIC COMPUTING, An Introductory Survey*, The McGraw-Hill Companies 1997.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA W JĘZYKU ANGIELSKIM

- [1] J. Wilkinson, *Algebraic Symmetric Problems*, Clarendon Press, Oxford 1965.
[2] J. Wilkinson, C. Reinsch (red.), *Handbook for Automatic Computations, t. 2, Linear Algebra*, Springer-Verlag, Heidelberg 1971.
[3] F.S. Acton, *Numerical Methods that Work*, The Mathematical Association of America, Washington 1990.
[4] B.N. Parlett, *The Symmetric Eigenvalue Problem*, Prentice-Hall, New York 1980;
[5] I.S. Dhillon, *A New $O(n^2)$ Algorithm for the Symmetric Tridiagonal Eigenvalue/Eigenvector Problem*, Phd Thesis, University of California, Berkeley 1997; <http://www.cs.utexas.edu/users/inderjit/>;
I. S. Dhillon, B.N. Parlett, *Orthogonal eigenvectors and relative gaps*, <http://www.cs.utexas.edu/users/inderjit/>.

OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIĘ, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)

Włodzimierz Salejda, wlodzimierz.salejda@pwr.wroc.pl
Karol Tarnowski, karol.tarnowski@pwr.wroc.pl
Jacek Olszewski, jacek.olszewski@pwr.wroc.pl

MACIERZ POWIĄZANIA EFEKTÓW KSZTAŁCENIA DLA PRZEDMIOTU

METODY NUMERYCZNE W FIZYCE

Z EFEKTAMI KSZTAŁCENIA NA KIERUNKU FIZYKA TECHNICZNA

W SPECJALNOŚCIACH: FOTONIKA

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_W03,	K2FTE_W06	C1	W.1 – W.15	N1, N6
PEK_U01	K2FTE_U01	C1	W.1 – W.15	N1, N6
PEK_U02	K2FTE_U01, K2FTE_U02	C2	Ćw.1 – Ćw.15	N2, N4, N5, N6
PEK_U03	K2FTE_U01, K2FTE_U02, K2FTE_U03	C2	Lab. 1 – Lab. 15	N3, N4, N5, N6
PEK_K01-PEK_K03	K2FTE_K01, K2FTE_K03, K2FTE_K05	C3.	W.1.-W.15. Ćw.1.-Ćw.15. Lab. 1 – Lab. 15	N1 – N6

Wrocław, 16 września 2013