

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2021/2022

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna - New

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT new

Stopień studiów: II

Specjalności: Modelowanie Komputerowe - New

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Symulacje komputerowe w fizyce i inżynierii
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Computer simulations in physics and engineering
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT NEW oIIS D1 21/22
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 KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
1	15	0	0	30	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 i inżynierii.

Cel 4 Zapoznanie z metodami dynamiki molekularnej.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Podstawowa 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 i inżynierii.

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 i inżynierii.

EK6 Umiejętności Umiejętność numerycznego rozwiązania równań różniczkowych w fizyce kwantowej.

EK7 Umiejętności Umiejętność pisania programów 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 i inżynierii: 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 i inżynierii, metody numeryczne dla równań adwekcji, dyfuzji, Laplacea, Poissona i falowego, numeryczne rozwiązywanie równania Schrödingera, dyskretyzacja równania Schrödingera w pudle potencjału i kwantowego oscylatora harmonicznego.	10
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 Metropolis, model XY, przejście Kosterlitz-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

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
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 Levyego, symulacja aktywnej materii.	10

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Wprowadzenie do środowiska programistycznego i bibliotek multimedialnych.	2
K2	Symulacja cząsteczek w polach: grawitacyjnym i elektromagnetycznym.	6
K3	Rozwiązywanie zagadnień zadanych równaniami adwekcji, dyfuzji, Laplacea, Poissona i falowym.	6
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.	6
K6	Model XY.	6
K7	Modele ciekłych kryształów.	6
K8	Modelowanie procesów agregacji i adsorpcji.	6
K9	Symulacja cząsteczek oddziałujących wybranym potencjałem. Obliczanie obserwabli na podstawie symulacji.	8
K10	Symulacja ruchów Browna, lotów Levyego 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 (Mathematica)

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	90
Konsultacje przedmiotowe	30
Egzaminy i zaliczenia w sesji	5
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	25
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: 1/3 sprawozdanie + 1/3 kolokwia + 1/3 egzamin

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU

W1 Warunkiem podejścia do egzaminu jest zaliczenie laboratorium komputerowego

W2 Nie więcej niż 3 nieobecności w każdym semestrze (dotyczy obowiązkowych form zajęć przewidzianych przez Regulamin studiów)

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.

NA OCENĘ 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Dość dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Ponad dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Dość dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Ponad dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Dość dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Ponad dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Podstawowa znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 50% zadań.

NA OCENĘ 3.5	Dość dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Ponad dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Bardzo dobra znajomość prezentowanego tematu. Wykonanie przynajmniej 90% zadań.
EFEKT KSZTAŁCENIA 5	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
EFEKT KSZTAŁCENIA 6	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
EFEKT KSZTAŁCENIA 7	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.

EFEKT KSZTAŁCENIA 8	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
EFEKT KSZTAŁCENIA 9	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% zadań. Umiejętność twórczego wykorzystywania zdobytych umiejętności.
EFEKT KSZTAŁCENIA 10	
NA OCENĘ 2.0	Brak spełnienia wymagań na ocenę 3.0.
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie przynajmniej 50% zadań.
NA OCENĘ 3.5	Wykonanie przynajmniej 60% zadań.
NA OCENĘ 4.0	Wykonanie przynajmniej 70% zadań.
NA OCENĘ 4.5	Wykonanie przynajmniej 80% zadań.
NA OCENĘ 5.0	Wykonanie przynajmniej 90% 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		Cel 1	W1	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK2		Cel 2	W1	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK3		Cel 3	W2	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK4		Cel 3 Cel 4	W3	N1 N2 N3 N4	F3 P1 P2
EK5		Cel 1	K1 K2 K3	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK6		Cel 2	K4	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK7		Cel 3	K5 K6 K7 K8	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK8		Cel 3 Cel 4	K9 K10	N3 N4 N5 N6	F1 F2 P1 P2
EK9		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		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** — *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)

.....