



Inżynierskie metody numeryczne 2

Karta opisu przedmiotu

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Informatyka Stosowana	Cykl dydaktyczny 2019/2020
Specjalność -	Kod przedmiotu JINSS.li40K.4bc3708d3bf3fb2d89a43b483074be6a.19
Jednostka organizacyjna Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej	Języki wykładowe polski
Poziom kształcenia Studia inżynierskie I stopnia	Obligatoryjność Obowiązkowy
Forma studiów Stacjonarne	Blok zajęciowy Przedmioty kierunkowe
Profil studiów Ogólnoakademicki	Przedmiot powiązany z badaniami naukowymi Tak
Koordynator przedmiotu	Tomasz Chwiej
Prowadzący zajęcia	Tomasz Chwiej

Okres Semestr 7	Forma zaliczenia Egzamin	Liczba punktów ECTS 6
	Forma prowadzenia i godziny zajęć Wykład: 30 Ćwiczenia laboratoryjne: 30	

Cele kształcenia dla przedmiotu

C1	przekazanie studentom wiedzy z zakresu numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych przy użyciu baz funkcyjnych
C2	nabycie przez studentów umiejętności numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych przy użyciu baz funkcyjnych

Efekty uczenia się dla przedmiotu

Kod	Efekty w zakresie	Kierunkowe efekty uczenia się	Metody weryfikacji
Wiedzy - Student zna i rozumie:			
W1	Student zna podstawowe typy równań cząstkowych i wie jakie zjawiska fizyczne są przez nie opisane.	INS1A_W01, INS1A_W04	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
W2	Student zna typowe schematy różnicowe dedykowane równaniom cząstkowym.	INS1A_W01, INS1A_W04	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
W3	Student zna ideę stosowania metod Monte Carlo dla równań cząstkowych	INS1A_W01, INS1A_W04	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
W4	Student zna pojęcia związane z metodą elementów skończonych, metodą elementów brzegowych.	INS1A_W01, INS1A_W04	Aktywność na zajęciach, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
Umiejętności - Student potrafi:			
U1	Student potrafi implementować wybrane algorytmy metody Monte Carlo do rozwiązywania równań różniczkowych i/lub równań całkowych	INS1A_U01, INS1A_U05, INS1A_U06	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
U2	Student potrafi implementować wszystkie składniki metody elementów skończonych i brzegowych dla prostych problemów.	INS1A_U01, INS1A_U05, INS1A_U06	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych

Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z numerycznymi metodami rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych z wykorzystaniem baz funkcyjnych i metody Monte Carlo oraz równań całkowych.

Nakład pracy studenta

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane aktywności
Przygotowanie do zajęć	30
Wykład	30
Ćwiczenia laboratoryjne	30
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	58
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 150
Liczba godzin kontaktowych	Liczba godzin 60

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Treści programowe

Lp.	Treści programowe	Efekty uczenia się dla przedmiotu	Formy prowadzenia zajęć
1.	<p>1. Rozwiązywanie różniczkowych równań cząstkowych w bazie funkcyjnej: Metoda kolokacji. Metoda najmniejszych kwadratów. Metoda wariacyjna Reyleigha-Ritza. Metoda reszt ważonych. Metoda Galerkina. Sformułowanie metody różnic skończonych w formalizmie reszt ważonych.</p> <p>2. Metoda elementów skończonych: Funkcje kształtu. Silna i słaba postać równania różniczkowego. Macierz sztywności i wektor obciążeń. Równanie własne w metodzie elementów skończonych. Przegląd funkcji kształtu Lagrange'a i Hermite'a. Kwadratury Gaussa-Legendre'a dla numerycznego całkowania macierzy sztywności. Przestrzeń odniesienia. Mapowanie z przestrzeni fizycznej do przestrzeni odniesienia. Składanie macierzy sztywności i wektora obciążeń. Elementy czworokątne. Elementy trójkątne. Współrzędne połowe. Całkowanie metodą Gaussa dla elementów trójkątnych.</p> <p>3. Metoda elementów skończonych dla problemów zależnych od czasu: Równania paraboliczne i hiperboliczne. Analiza stabilności. Twierdzenie Ironsa. Brykietowanie masy.</p> <p>4. Metoda elementów brzegowych: Funkcja Greena i rozwiązanie fundamentalne dla równania Poissona. Słaba forma równania różniczkowego z wagą - rozwiązaniem fundamentalnym. Funkcje kształtu dla elementów brzegowych. Macierze wpływu i ich całkowanie numeryczne. Reguły sum.</p> <p>5. Równania całkowe: Klasyfikacja równań całkowych w 1D, numeryczne metody rozwiązywania równań Fredholma i Volterra.</p> <p>6. Rozwiązywanie różniczkowych równań cząstkowych i równań całkowych metodami Monte Carlo: Rozwiązywanie układów równań liniowych metodami Monte Carlo. Metody von Neumanna-Ulana. Rozwiązywanie równania Laplace'a metodą błędzenia przypadkowego. Oczekiwany czas błędzenia. Równania adwekcji-dyfuzji jako przykład problemu błędzenia przypadkowego. Schemat błędzenia przypadkowego dla równań parabolicznych ze stałą i zmienną długością kroku. Metody szacowania rozwiązań równań całkowych.</p>	W1, W2, W3, W4	Wykład

2.	<p>1. Rozwiązanie równania różniczkowego w bazie funkcyjnej: implementacja metod kolokacji, Galerkina i najmniejszych kwadratów w celu rozwiązania równania różniczkowego w 1D.</p> <p>2. Metoda elementów skończonych w jednym wymiarze: implementacja metody elementów skończonych z wykorzystaniem liniowych funkcji kształtu w celu rozwiązania równania różniczkowego 1D.</p> <p>3. Metoda elementów skończonych w dwóch wymiarach: elementy czworokątne: implementacja metody elementów skończonych wykorzystującej elementy czworokątne w celu rozwiązania równania różniczkowego w 2D.</p> <p>4. Metoda elementów skończonych w dwóch wymiarach - elementy trójkątne: implementacja metody elementów skończonych wykorzystującej elementy trójkątne w celu rozwiązania równania różniczkowego w 2D.</p> <p>5. Metoda elementów skończonych w dwóch wymiarach - elementy trójkątne z adaptacją siatki: implementacja metody elementów skończonych wykorzystującej elementy trójkątne z progresywną adaptacją siatki w celu udokładnienia rozwiązania równania różniczkowego w 2D.</p> <p>6. Metoda elementów brzegowych: implementacja metody elementów brzegowych w celu rozwiązania równania różniczkowego w 2D.</p> <p>7. Metoda Monte Carlo: implementacja metody MC w celu rozwiązania równania różniczkowego lub całkowego</p>	W1, W2, W3, W4, U1, U2	Ćwiczenia laboratoryjne
----	---	------------------------	-------------------------

Informacje rozszerzone

Metody i techniki kształcenia:

Mini wykład

Rodzaj zajęć	Metody zaliczenia	Warunki zaliczenia przedmiotu
Wykład	Egzamin	zdany egzamin końcowy
Ćwiczenia laboratoryjne	Aktywność na zajęciach, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych	pozytywna ocena końcowa liczona jako średnia z ocen częściowych

Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu

1. Sposób zaliczania zajęć laboratoryjnych: Na każdym zajęciach realizowany jest oddzielny projekt numeryczny, w ramach którego należy napisać SAMODZIELNIE program komputerowy rozwiązujący określone zadania zgodnie z instrukcją. Ocenie podlega stopień realizacji projektu - ocena z danych zajęć zawiera się w skali od 0 do 100 punktów. Pod koniec semestru, po zakończeniu wszystkich zajęć, wszystkie punkty są sumowane i dzielone przez maksymalną liczbę punktów jaką można uzyskać (100 pkt x liczba zajęć) - wynik procentowy przeliczany jest na ocenę zgodnie ze skalą zamieszczoną w regulaminie studiów AGH. Niedopuszczalne jest wykorzystywanie fragmentów kodów innych osób. Jeśli prowadzący stwierdzi ZNACZĄCE

podobieństwo kodów źródłowych programów pochodzących od różnych osób, wówczas przypadek taki traktowany jest jako plagiat a osoby te otrzymują 0 punktów za dane zajęcia. Podstawowym terminem uzyskania zaliczenia jest koniec zajęć w danym semestrze. Student może dwukrotnie przystąpić do poprawkowego zaliczania ćwiczeń, co należy rozumieć jako poprawę wyników z dwóch zajęć laboratoryjnych, na których uzyskał najmniejszą liczbę punktów. Student wykonuje samodzielnie wybrane przez prowadzącego jedno lub dwa ćwiczenia i przedstawia prowadzącemu wyniki i kod źródłowy w formie pisemnego raportu. Student, który bez usprawiedliwienia opuścił więcej niż dwa ćwiczenia i nie uzyskał zaliczenia z ćwiczeń laboratoryjnych w terminie podstawowym może zostać pozbawiony przez prowadzącego zajęcia możliwości uzyskania zaliczenia w terminach poprawkowych. 2. Obecność na wykładzie: zgodnie z Regulaminem Studiów AGH. 3. Egzamin: Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest wcześniejsze uzyskanie zaliczenia z ćwiczeń laboratoryjnych. Egzamin przeprowadzany jest zgodnie z Regulaminem Studiów AGH § 16.

Sposób obliczania oceny końcowej

Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny końcowej z modułu jest wcześniejsze uzyskanie pozytywnych ocen z ćwiczeń laboratoryjnych i egzaminu. Ocena końcowa liczona jest jako średnia ważona ocen z laboratorium (L) oraz egzaminu (E) $OK = 0.4 \times E + 0.60 L$

Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach

Nieobecność na zajęciach laboratoryjnych wymaga od studenta samodzielnego opanowania przerabianego na tych zajęciach materiału oraz wykonania projektu w domu. W przypadku nieobecności usprawiedliwionej, w ciągu tygodnia od zakończenia zajęć należy przesłać prowadzącemu raport zawierający WSZYSTKIE wymagane wyniki (wraz z krótkimi komentarzami) oraz kod źródłowy programu. Raport wraz z kodem ocenianie są w skali od 0 do 100 punktów.

Wymagania wstępne i dodatkowe

- Umiejętność programowania w języku C lub innym.
- Wiedza i umiejętności z zakresu równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych, problemu początkowego i brzegowego oraz równań całkowych.
- Wiedza z zakresu podstawowych metod numerycznych.

Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa

Wykład: Studenci uczestniczą w zajęciach poznając kolejne treści nauczania zgodnie z sylabusem przedmiotu. Studenci winni na bieżąco zadawać pytania i wyjaśniać wątpliwości. Rejestracja audiowizualna wykładu wymaga zgody prowadzącego. Ćwiczenia laboratoryjne: Studenci wykonują ćwiczenia laboratoryjne zgodnie z materiałami udostępnionymi przez prowadzącego. Student jest zobowiązany do przygotowania się w przedmiocie wykonywanego ćwiczenia, co może zostać zweryfikowane kolokwium w formie ustnej lub pisemnej. Zaliczenie zajęć odbywa się na podstawie zaprezentowania rozwiązania postawionego problemu. Zaliczenie modułu jest możliwe po zaliczeniu wszystkich zajęć laboratoryjnych.

Literatura

Obowiązkowa

1. Solin, P. Partial "Differential Equations and the Finite Element Method" J. Wiley & Sons, New York, 2005,
2. Zienkiewicz O. " Finite Element Method for Its Basis and Fundamentals", Butterworth-Heinemann , 2005

Dodatkowa

1. Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F., Numerical mathematics, : Texts in Applied Mathematics , Vol. 37 , 2007
2. Lienhard J.H., "Heat transfer textbook", Phlogiston Press, 2003

Badania i publikacje

Publikacje

1. 1. T. Chwiej, K. Kutorasiński, "Effect of Coulomb correlation on electron transport through a concentric quantum ring-quantum dot structure", Phys. Rev. B 81, 165321 (2010) - rozwiązanie cząstkowego równania różniczkowego metodą Galerkiną w bazie gaussowskiej (diagonalizacja macierzy operatora energii w bazie funkcyjnej), optymalizacja

parametrów bazy funkcyjnej, przeprowadzenie symulacji czasowej zachowania układu dwóch cząstek (rozwiązanie RRCz) przy wykorzystaniu metody spektralnej.

2. T. Chwiej, B. Szafran, "Signatures of antibonding hole ground states in exciton spectra of vertically coupled quantum dots in an electric field", Phys. Rev. B 81, 075302 (2010) - zastosowanie metody Galerkina (baza funkcji harmoniczych) do rozwiązania problemu własnego jedno- i dwucząstkowego, optymalizacja rozwiązań (minimalizacja energii) przy wykorzystaniu zasady wariacyjnej.
3. T. Chwiej and B. Szafran, "Schrodinger-Poisson calculations for scanning gate microscopy of quantum rings based on etched two-dimensional electron gas", Phys. Rev. B 87, 085302 (2013) - rozwiązanie problemu własnego przy użyciu metody Galerkina (baza funkcji Gaussa), rozwiązanie numeryczne cząstkowego równania różniczkowego (rów. Poissona) przy użyciu FFT
4. T. Chwiej, "Electron motion induced by magnetic pulse in a bilayer quantum wire", Phys. Rev. B 93, 235405 (2016) - zastosowanie schematu Rungego-Kutty 4 rzędu do rozwiązania cząstkowego równania różniczkowego z warunkiem początkowym (ewolucja czasowa)
5. T. Chwiej, "Partial spin polarization of a conductance in a bi-layer In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As heterostructure based nanowire for the rectangular and the smooth lateral confinement potentials", Physica E 77, 169 (2016) - numeryczne wyznaczanie funkcji Greena dla różniczkowego operatora energii w celu określenia lokalnej gęstości stanów i współczynników transmisji

Kierunkowe efekty uczenia się

Kod	Treść
INS1A_U01	potrafi pracować indywidualnie i w zespole, odpowiednio planując prace i korzystając z wszelkich baz danych, literatury i innych źródeł
INS1A_U05	potrafi wykorzystać uzyskaną wiedzę informatyczną i poznane modele matematyczne do wszechstronnej oceny i diagnostyki systemów informatycznych
INS1A_U06	potrafi dokonać algorytmizacji problemu inżynierskiego i posługując się odpowiednimi metodami i narzędziami potrafi zaprojektować i wykonać odpowiedni system informatyczny
INS1A_W01	zna i rozumie podstawowe zagadnienia z zakresu matematyki i fizyki
INS1A_W04	zna i rozumie matematyczne podstawy modelowania i projektowania komputerowego