



Inżynierskie metody numeryczne

Karta opisu przedmiotu

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Informatyka Stosowana	Cykl dydaktyczny 2020/2021	
Specjalność -	Kod przedmiotu JINSS.li10K.6d4d0d8245521696a7b932d929e44e71.20	
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 5	Forma zaliczenia Egzamin	Liczba punktów ECTS 5
	Forma prowadzenia i godziny zajęć Wykład: 30 Ćwiczenia laboratoryjne: 30	

Cele kształcenia dla przedmiotu

C1	przekazanie studentom wiedzy związanej z konstrukcją i własnościami podstawowych schematów służących do numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych
C2	nabycie przez studentów umiejętności rozwiązywania typowych problemów technicznych opisywanych za pomocą równań różniczkowych

Efekty uczenia się dla przedmiotu

Kod	Efekty w zakresie	Kierunkowe efekty uczenia się	Metody weryfikacji
Wiedzy - Student zna i rozumie:			
W1	Student zna pojęcia spójności stabilności i zbieżności schematów różnicowych.	INS1A_W04	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
W2	Student zna pojęcia związane z równaniami różniczkowymi. Potrafi omówić najważniejsze metody dyskretyzacji równań zależnych od czasu. Student zna podstawowe typy równań cząstkowych i wie jakie zjawiska fizyczne są przez nie opisane. Student zna typowe schematy różnicowe dedykowane równaniom cząstkowych.	INS1A_W01, INS1A_W04	Aktywność na zajęciach, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin
Umiejętności - Student potrafi:			
U1	Student potrafi analizować zbieżność, spójność oraz stabilność schematów różnicowych.	INS1A_U01, INS1A_U05	Egzamin
U2	Student potrafi implementować schematy jawne i niejawne, jednokrokowe oraz wielokrokowe w programach komputerowych całkujących równania różniczkowe zwyczajne. Student potrafi implementować schematy różnicowe dedykowane równaniom cząstkowym (adwekcji, dyfuzji, falowe, Poissona).	INS1A_U01, INS1A_U05, INS1A_U06	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych
U3	Student potrafi rozwiązywać problemu początkowe oraz brzegowe metodą różnic skończonych	INS1A_U01, INS1A_U05, INS1A_U06	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Egzamin

Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Moduł umożliwia studentom zdobycie podstawowej wiedzy i umiejętności związanych z wykorzystaniem metod numerycznych do rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych.

Nakład pracy studenta

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane aktywności
Wykład	30
Ćwiczenia laboratoryjne	30
Przygotowanie do zajęć	20
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	45
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 127
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. Wstęp do metod numerycznych dla różniczkowych równań zwyczajnych</p> <ul style="list-style-type: none"> • podstawowe pojęcia numerycznej analizy różniczkowych równań zwyczajnych na przykładzie jawnej metody Eulera • dyskretyzacja zmiennej czasowej • błąd lokalny schematu, zakumulowany błąd globalny, błąd dyskretyzacji, spójność metody, zbieżność, rząd zbieżności <p>2. Jawne i niejawne schematy różnicowe</p> <ul style="list-style-type: none"> • stabilność bezwzględna metody różnicowej, region bezwzględnej stabilności, błędy zaokrągleń a optymalny krok czasowy • problemy sztywne • niejawna metoda Eulera • rozwiązywanie równań metod niejawnych: iteracja funkcjonalna, metoda Newtona <p>3. Metody jednokrokowe wysokiej dokładności</p> <ul style="list-style-type: none"> • metody Rungego-Kutty: forma ogólna. • tabele Butchera. • niejawne metody RK <p>4. Stabilność i dokładność metod jednokrokowych</p> <ul style="list-style-type: none"> • szacowanie błędów metod jednokrokowych. • ekstrapolacja Richardsona. • automatyczny dobór kroku czasowego. • detekcja sztywności i problemy nieliniowe. <p>5. Liniowe metody wielokrokowe</p> <ul style="list-style-type: none"> • metody Adamsa-Bashforta • metody Adamsa Moultona • metody różnic wstecznych <p>6. Spójność, zbieżność i stabilność liniowych metod wielokrokowych</p> <ul style="list-style-type: none"> • rozwiązania pasożytnicze • wielomiany charakterystyczne • twierdzenie o ekwiwalencji Dahlquista • metody predyktor - korektor. <p>7. Wstęp do równań różniczkowych cząstkowych</p> <ul style="list-style-type: none"> • Typy równań drugiego rzędu. • Wstęp do podejścia różnic skończonych. • Operatory różnicowe. <p>8. Eliptyczne równania cząstkowe</p> <ul style="list-style-type: none"> • Równanie Laplace'a i Poissona. • Zasada najmniejszego działania równania Eulera Lagrange'a w wersji ciągłej i dyskretnej. • Metody iteracyjne rozwiązywania równań eliptycznych w metodzie równań skończonych. • Widmo macierzy iteracji a tempo zbieżności. Metody wielosiatkowe. <p>9. Równania cząstkowe dynamiki płynów.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Gęstość prądu i równanie ciągłości. • Linie strumienia i funkcja strumienia. • Równania Eulera dla przepływu z zaniedbaniem lepkości. • Przepływ potencjalny. • Równania Naviera-Stokesa. • Wyrażenie równań Naviera-Stokesa przez funkcje strumienia i wirowości. • Przepływ stacjonarny cieczy lepkiej, rozwiązanie metodą różnic skończonych. • Warunki brzegowe na funkcje strumienia i wirowość. <p>10. Metody różnic skończonych dla równań cząstkowych na przykładzie równania adwekcji</p> <ul style="list-style-type: none"> • Metody upwind, downwind i centralna. • Domena zależności fizycznej i numerycznej. • Kryterium CFL. • Spójność, zbieżność, stabilność: definicje dla różnych norm. • Bezwzględna stabilność. • Analiza stabilności von Neumanna. • Schematy Laxa-Friedrichsa i Laxa-Wendorffa. • Macierzowa analiza stabilności. • Tw. o ekwiwalencji Laxa. Szacowanie błędów a posteriori. • Dyfuzja numeryczna. • Metody wielopoziomowe oraz metody niejawne. • Schemat Cranka-Nicholsona. <p>11. Metody numeryczne dla równań parabolicznych i hiperbolicznych</p> <ul style="list-style-type: none"> • Równanie przewodnictwa cieplnego. • Prawo Fouriera i Newtona. • Stabilność i dokładność metod jawnych i niejawnych. • Równanie adwekcji - dyfuzji • Równanie falowe, rozwiązanie schematami Verleta i Newmarka 	W1, W2, U1	Wykład
----	--	------------	--------

2.	<p>1. Schematy jawne i niejawne dla równań różniczkowych zwyczajnych</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi napisać program komputerowy rozwiązujący równanie różniczkowe zwyczajne schematem Eulera w wersji jawnej • Student potrafi rozwiązywać problem nieliniowy występujący w niejawnej wersji schematu Eulera metodą Newtona • Student potrafi napisać program, który rozwiązuje równanie różniczkowe zwyczajne i jednocześnie szacuje błąd uzyskanego rozwiązania przybliżonego • Student potrafi napisać program, który na podstawie oszacowania błędu doбира krok czasowy dla zadanej tolerancji metodą ekstrapolacji Richardsona • Student potrafi rozwiązywać równania i układy równań różniczkowych jawnymi metodami Rungego-Kutty 2 i 4 rzędu <p>2. Częstkowe eliptyczne równania różniczkowe</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi zaimplementować metody relaksacji i nadrelaksacji dla równania Poissona w 2D • Student potrafi zaimplementować wielosiatkową strategię rozwiązywania równania Poissona. <p>3. Przepływ potencjalny</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi napisać program komputerowy rozwiązujący problem przepływu nielepkiego wyrażonego przez potencjał oraz funkcję strumienia <p>4. Przepływ lepki</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi napisać program komputerowy rozwiązujący problem przepływu lepkiego wyrażonego przez wirowość oraz funkcję strumienia metodą różnic skończonych ze szczególnym uwzględnieniem implementacji warunków brzegowych <p>5. Równanie adwekcji</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi rozwiązać numerycznie metodą różnic skończonych problem adwekcji dla pola prędkości rozwiązane w przepływie lepkim <p>6. Równanie dyfuzji ciepła</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi rozwiązać numerycznie metodą różnic skończonych problem dyfuzji ciepła metodą Cranka-Nicolsona i przeanalizować bilans cieplny przepływu <p>7. Równanie falowe</p> <ul style="list-style-type: none"> • Student potrafi rozwiązać numerycznie metodą różnic skończonych problem drgającej struny z uwzględnieniem tłumienia i wymuszenia i analizą rezonansów zależnie od częstości siły wymuszającej oraz sposobu jej przyłożenia 	W1, W2, U1, U2, U3	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 cząstkowych

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

1. Zaliczanie ćwiczeń laboratoryjnych: Na każdym zajęciach laboratoryjnych wykonywany jest oddzielny projekt, którego realizacja polega na numerycznym rozwiązaniu pojedynczego równania różniczkowego lub ich układu samodzielnie przez studenta. Po zakończeniu każdego zajęcia, prowadzący na podstawie stopnia realizacji projektu (wyniki + kod źródłowy programu) ocenia aktywność studenta w skali od 0 do 100 punktów. Jeśli nie zdołał on zrealizować całego projektu na zajęciach, zobowiązany jest wówczas do dokończenia go samodzielnie w domu. W przypadku usprawiedliwionej nieobecności na zajęciach, projekt należy wykonać w domu i w ciągu tygodnia od zakończenia zajęć przesłać prowadzącemu raport w postaci pliku pdf oraz kod źródłowy programu. Raport powinien zawierać **WSZYSTKIE WYMAGANE** wyniki wraz z ich opisem.

Raport oceniany jest w skali od 0 do 100 punktów, które traktowane są jako aktywność z danych zajęć. Niedopuszczalne jest kopiowanie fragmentów lub całego kodu źródłowego programu od innych osób. Osoby, u których prowadzący stwierdzi ZNACZĄCE podobieństwo kodów źródłowych otrzymują 0 punktów z danych zajęć. Po zakończeniu semestru, wszystkie punkty są sumowane, a wynik dzielony przez maksymalną liczbę punktów możliwą do zdobycia (=100 pkt. x liczba zajęć) - uzyskany wynik procentowy jest przeliczany na ocenę zgodnie z regulaminem studiów AGH. Osoby, które nie uzyskały zaliczenia w terminie podstawowym oraz nie opuściły z przyczyn nieusprawiedliwionych więcej niż 2 zajęć mogą przystąpić do dwóch terminów poprawkowych. Na każdym z nich realizowany jest jeden projekt, a punkty uzyskane za jego wykonanie zastępują najgorszy wynik uzyskany w semestrze, po czym ponownie obliczany jest sumaryczny wynik procentowy i przeliczany na ocenę z zaliczenia według algorytmu przytoczonego powyżej. 2. Egzamin: Obecność na wykładzie: zgodnie z Regulaminem Studiów AGH. Warunkiem dopuszczenia studenta do egzaminu jest uzyskanie przez niego zaliczenia z ćwiczeń laboratoryjnych.

Sposób obliczania oceny końcowej

Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny końcowej jest: 1) zaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych oraz 2) zdany egzamin. Ocena końcowa (OK) obliczana jest według wzoru: $OK=0.4 \cdot E+0.6 \cdot L$ gdzie: E - ocena z egzaminu liczona jako średnia arytmetyczna z wszystkich ocen jakie student uzyskał na kolejnych terminach jeśli wynosi ona conajmniej 3.0 lub 3.0 w przeciwnym wypadku, L - ocena uzyskana z ćwiczeń laboratoryjnych

Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach

Jeśli student nie uczestniczył w zajęciach, wówczas jest on zobowiązany do samodzielnego wykonania projektu w domu. W przypadku nieobecności usprawiedliwionej należy wykonać raport, który podlega ocenie w skali 0-100 pkt.

Wymagania wstępne i dodatkowe

- Umiejętność programowania w języku C na poziomie 4 semestru
- Wiedza i umiejętności w zakresie matematyki na poziomie 4 semestru
- Wiedza z zakresu podstawowego kursu 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.

Literatura

Obowiązkowa

1. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, "Numerical Recipes in C", Cambridge University Press, 1992
2. F. J. Vesely, "Computational Physics", Springer, 2001
3. J. D. Hoffman, "Numerical methods for engineers and scientists", Marcel Dekker, 1992

Dodatkowa

1. A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, "Numerical mathematics", Springer, 2000
2. J.H. Lienhard, "Heat transfer textbook", Phlogiston Press, 2003

Badania i publikacje

Publikacje

1. 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 Galerkin (baza funkcji Gaussa), rozwiązanie numeryczne cząstkowego równania różniczkowego (rów. Poissona)

przy użyciu FFT

2. 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 rozwiązywania cząstkowego równania różniczkowego z warunkiem początkowym (ewolucja czasowa)
3. T. Chwiej, B. Szafran, "Fractional conductance oscillations in quantum rings: wave packet picture of transport in a few-electron system", *J. Phys.: Condens. Matter* 25, (2013) 155802 - zastosowanie metody Crank-Nicolson w numerycznej symulacji kilkuelektronowego pakietu falowego
4. T. Chwiej, J. Płonka, "Transient magnetic hybridization of spin and orbital degrees of freedom in two-dimensional quantum rings", *Physica. E, Low-Dimensional Systems & Nanostructures* ; ISSN 1386-9477. — 2018 vol. 102, s. 73-82 - rozwiązanie zależnego od czasu dwucząstkowego równania Schrödingera w bazie funkcyjnej stanów własnych jednocząstkowego różniczkowego operatora energii.
5. T. Chwiej, "Effect of picosecond magnetic pulse on dynamics of electron's subbands in semiconductor bilayer nanowire", *Physica. E, Low-Dimensional Systems & Nanostructures* ; ISSN 1386-9477. — 2017 vol. 94, s. 139-147 - numeryczne wyznaczanie funkcji Greena w celu określenia współczynników transmisji oraz gęstości ładunku oraz wyznaczanie rozkładu potencjału elektrostatycznego metodą FFT liczonego jako spłot potencjału kulombowskiego i rozkładu gęstości ładunku

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