



**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE**

Metody obliczeniowe w fizyce i technice 2

Bartłomiej Szafran

3 października 2022



- Przedmiot dotyczy rozwiązywania numerycznego równań mechaniki kwantowej oraz zastosowań metody Galerkinia i pochodnych (metoda elementów skończonych) do rozwiązywania równań różniczkowych.
- Ostatni semestr studiów I stopnia dla fizyki technicznej, blok przedmiotów Symulacje komputerowe w fizyce i technice
- Efekty kształcenia
 - ❶ Student zna metody różnicowe rozwiązywania prostych problemów kwantowomechanicznych
 - ❷ Student zna podstawy kwantowych metod wariacyjnych
 - ❸ Student zna podstawy metody elementów skończonych



- Efekty kształcenia
 - 1 Student umie dokonać implementacji komputerowej wybranej metody różnicowej równania własnego operatora Hamiltona oraz równania Schroedingera zależnego od czasu.
 - 2 Student umie dokonać implementacji komputerowej metody wariacyjnej Rayleigha-Ritza dla problemu jednej cząstki
 - 3 Student potrafi konstruktywnie współpracować w ramach zespołu w celu wspólnego opracowania programów do numerycznego rozwiązywania prostych problemów fizyki kwantowej



- Wykład 18h
- Ćwiczenia laboratoryjne 15h
- Ćwiczenia projektowe 15h



- Metody różnicowe rozwiązywania jednowymiarowych kwantowych problemów stacjonarnych dla stanów zlokalizowanych. Metoda strzałów. Metoda czasu urojonego. Diagonalizacja Hamiltonianu różnicowego.
- Metody rozwiązywania zależnego od czasu równania Schroedingera. Dekompozycja stanu początkowego na stany własne. Metody różnicowe (Eulera, Cranka-Nicolson, Askara-Cakmaka). Pakiety falowe, twierdzenie Ehrenfesta. Analiza pakietu w przestrzeni pędów. Hamiltonian zależny od czasu. Przejścia wymuszone.
- Rozwiązanie problemu rozproszeniowego.



- Stany związane dla problemów wielowymiarowych. Radialne równanie Schroedingera.
- Twierdzenie i metoda wariacyjna. Metoda Reyleigha-Ritza.
- Metoda elementów skończonych dla równania Schroedingera
- Metoda elementów skończonych dla problemów kwantowomechanicznych.
- Kwantowa dyfuzyjna wariacyjna metoda Monte Carlo
- Metoda Galerkina
- Metoda elementów skończonych dla problemów stacjonarnych i zależnych od czasu



- 1 F.J. Vesely “Computational Physics, An Introduction” (Plenum Press, New York, 1994)
- 2 Tao Pang „Metody obliczeniowe w fizyce” (PWN, Warszawa, 2001)
- 3 S.E. Koonin, D. Meredith „Computational Physics” (Addison-Wesley, Reading, 1990)
- 4 R.H. Landau, M.J. Paez „Computational Physics: Problem Solving with Computers” (Wiley Interscience, New York, 1997)
- 5 Pavel Solin, Partial Differential Equations and the Finite Element Method, John Wiley & Sons Inc 2005.



- Metoda strzałów dla równania Schroedingera
- Metoda czasu urojonego dla stanów własnych
- Problemy zależne od czasu
- Problemy rozproszeniowe.
- Metoda wariacyjna.



AGH ćwiczenia laboratoryjne

- Treść na tydzień przed zajęciami (UPEL)
- Zajęcia laboratoryjne: Studenci powinni w trakcie zajęć rozwiązać problemy wskazane przez prowadzącego z zadaną z góry punktacją.
- Zadania w części laboratoryjnej studenci rozwiązują indywidualnie
- Zaliczenie z ćwiczeń laboratoryjnych: na podstawie źródła i wyników uzyskanych w czasie zajęć.
- Zaliczenie poprawkowe z laboratorium dla studentów, którzy nie uzyskają w czasie zajęć 50% punktów, wiąże się z koniecznością rozwiązania zadań laboratoryjnych samodzielnie. W trybie poprawkowym można uzyskać do 50% punktów.



AGH ćwiczenie projektowe

- Zajęcia projektowe: Studenci powinni rozwiązać problemy wskazane przez prowadzącego z zadaną z góry punktacją z zaliczeniem do następnych ćwiczeń (źródło/wyniki – jak w poprzednim semestrze).
- Zaliczenie poprawkowe z projektu dla studentów, których wyniki przesłane w terminie zostaną ocenione na mniej niż 50%, wiąże się z koniecznością późniejszego wysłania źródła oraz wyników. W trybie poprawkowym można uzyskać do 50% punktów.
- Zadania projektowe rozwiązywane są przez zespoły dwuosobowe.
- W grupie o nieparzystej liczbie studentów tworzymy jeden zespół trzyosobowy.
- Projekt: Oscylator harmoniczny 2D w MES, podzielony na 4 części
 - 1 generacja elementów, liczenie lokalnych macierzy
 - 2 składanie macierzy globalnej, narzucenie warunków brzegowych
 - 3 optymalizacja pudła obliczeniowego, wyprowadzenie funkcji falowych
 - 4 rachunek zależny od czasu
- projekt za 1-3 będzie powieszony do przyszłego wtorku, 4 - później



- Ocena końcowa (OK) obliczana jest jako średnia ważona ocen z laboratorium (L), projektu (P) wg. wzoru
- $OK = 0.5L + 0.5P$
- Uzyskanie pozytywnej oceny końcowej (OK) wymaga uzyskania pozytywnej oceny z laboratorium (L), projektu (P)



- termin konsultacji – do uzgodnienia w każdej sprawie
- kontakt i wyniki: bszafran@agh.edu.pl
- tel: 603 605 298
- galaxy.agh.edu.pl/bszafran