



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Fizyka obliczeniowa, PG_00060225						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2023 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	3		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	5		Liczba punktów ECTS		5.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		egzamin		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Marta Łabuda				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	60		5.0		60.0	125
Cel przedmiotu	Celem zajęć jest zapoznanie studentów z zaawansowanymi metodami obliczeniowymi i symulacyjnymi, stosowanymi w wybranych działach fizyki (w szczególności w elektrodynamice, fizyce kwantowej i współczesnej). Omówienie sposobów ich programowania oraz omówienie typowych problemów z tym związanych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K6_U04] Potrafi planować i przeprowadzać eksperymenty, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować opinie. Posiada doświadczenie w pracy laboratoryjnej.	Student potrafi zaplanować i przeprowadzić symulację komputerową zjawiska fizycznego, dobrać odpowiednie metody numeryczne oraz ocenić dokładność i stabilność uzyskanych wyników. Student potrafi krytycznie analizować wyniki obliczeń numerycznych i symulacji, porównywać je z danymi eksperymentalnymi lub teoretycznymi, formułować wnioski oraz prezentować je w formie raportu lub wizualizacji graficznej.	[SU2] Assessment of ability to analyse information [SU3] Assessment of ability to use knowledge gained from the subject
	[K6_W02] Posiada uporządkowaną wiedzę w zakresie podstaw fizyki, obejmującą mechanikę, termodynamikę, elektryczność i magnetyzm, optykę, fizykę atomu i cząsteczki, fizykę ciała stałego, fizykę jądra atomowego i cząstek elementarnych.	Student zna podstawowe metody numeryczne stosowane do rozwiązywania równań fizycznych opisujących zjawiska z różnych działów fizyki (m.in. mechaniki, termodynamiki, elektrodynamiki i fizyki kwantowej). Student rozumie, w jaki sposób metody obliczeniowe umożliwiają ilościową analizę i symulację zjawisk fizycznych w różnych skalach-od układów klasycznych po zjawiska mikroskopowe w fizyce atomowej i ciała stałego.	[SW1] Assessment of factual knowledge
	[K6_W01] Rozumie cywilizacyjne znaczenie fizyki i jej zastosowań.	Student rozumie rolę metod obliczeniowych w rozwoju współczesnej fizyki i techniki oraz ich wpływ na postęp cywilizacyjny (np. energetyka, medycyna, technologie informacyjne, klimat). Student ma świadomość, że umiejętność stosowania metod obliczeniowych stanowi istotny element kompetencji współczesnego fizyka w kontekście rozwoju nauki, przemysłu i zrównoważonego rozwoju cywilizacji.	[SW1] Assessment of factual knowledge
	[K6_U02] Potrafi analizować i rozwiązywać proste problemy naukowe i techniczne w oparciu o posiadaną wiedzę, stosując metody analityczne, numeryczne, symulacyjne i eksperymentalne.	Student potrafi dokonać analizy problemu do rozwiązania i go rozwiązać.	[SU4] Assessment of ability to use methods and tools
	[K6_K05] Potrafi zaprezentować efekty swojej pracy, przekazać informacje w sposób powszechnie zrozumiały, komunikować się, dokonywać samooceny oraz konstruktywnej oceny efektów pracy innych osób.	Student potrafi dokonać prezentacji rezultatów swoich zadań.	[SK3] Assessment of ability to organize work

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład Modelowanie układów w skali nano w kontekście obliczeniowym. Modelowanie funkcji dielektrycznej - modele Drudego i Lorentza. Metody różnic skończonych (FDTD) i elementów skończonych (FEM) w rozwiązywaniu równań Maxwella. Przejście z dziedziny czasu do dziedziny częstotliwości z wykorzystaniem dyskretnej transformaty Fouriera (DFT). Podstawy mechaniki kwantowej w kontekście obliczeniowym. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Metody pola samouzgodnionego (SCF) i oddziaływania konfiguracji (CI). Pozostałe metody chemii kwantowej (funkcjonałów gęstości - DFT, klastrów sprzężonych - CC i inne). Analiza wybranych kodów komputerowych realizujących obliczenia kwantowo-mechaniczne (np. GRASP, ORCA i inne). Przedstawienie problemów związanych z programowaniem powyższych metod obliczeniowych i praktycznych sposobów ich rozwiązywania (problemy związane z dużą złożonością obliczeniową problemów, problemy zbieżności w metodzie pola samouzgodnionego, problemy związane z niedokładną numeryczną reprezentacją liczb rzeczywistych w pamięci komputera, problemy komunikacji między poszczególnymi modułami pakietów itp.). Elementy fizyki współczesnej. Badanie łamania symetrii (C, P, T) w fizyce jako metoda weryfikacji modelu standardowego. Metody obliczania i mierzenia elektrycznych momentów dipolowych atomów i cząsteczek. Treści przedmiotu - laboratoria Symulacje rozchodzenia się ciepła na płycie z wybranego materiału np. z wykorzystaniem pakietu COMSOL/FreeFEM. Wizualizacja graficzna wyników. (4 godz.) Symulacje propagacji światła widzialnego przez układy matryc nanocząstek złota/srebra z wykorzystaniem pakietu OmniSim, MiePlot, MEEP lub innych. (4 godz.) Wykorzystanie pakietu GRASP do kwantowo-mechanicznych obliczeń struktur atomowych: poziomy energetyczne, siły oscylatora i prawdopodobieństwa przejść dla wybranych atomów wieloelektronowych. (4 godz.) Obliczenia elektrycznych momentów dipolowych (EDM) wybranych atomów i cząsteczek jako przykłady na łamanie symetrii. Wykorzystanie pakietów GRASP, COWF oraz samodzielne programowanie. (4 godz.) Obliczenia struktury wybranych cząsteczek oraz parametrów spektroskopowych, a także widm IR/UV. (4 godz.) Wyznaczanie krzywych (powierzchni) energii potencjalnej. (4 godz.) Podstawy dynamiki molekularnej: rozwiązywanie równań ruchu, modelowanie prostych reakcji chemicznych. (4 godz.) Obliczenia wysokiej precyzji na przykładzie biblioteki Multiple Precision Integers and Rationals (MPIR) (2 godz.)		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawy metod numerycznych.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Laboratorium	50.0%	60.0%
	Egzamin	50.0%	40.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	J. F. Dobrowolski, Fizyka obliczeniowa. Podstawy i zastosowania, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2018 M. Kowalski, Symulacje komputerowe w fizyce i chemii kwantowej, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2016 R. Zienkiewicz, Metody elementów skończonych w mechanice i fizyce, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 2015 A. Grabowski, Podstawy dynamiki molekularnej i modelowania komputerowego, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2017 J. R. Reitz, F. J. Milford, Podstawy elektrodynamiki (tłumaczenie polskie), WNT, Warszawa 2014 A. Herman, Atomy i kwanty. Wprowadzenie do współczesnej spektroskopii atomowej, PWN 2006 M. Mansuripur, Field, Force, Energy and Momentum in Classical Electrodynamics (wydanie poprawione), Bentham Science Publishers, 2017 P. Jönsson, G. Gaigalas, C.F. Fischer, J. Bieroń, I.P. Grant, T. Brage, J. Ekman, M. Godefroid, J. Grumer, J. Li, W. Li, GRASP Manual for Users. Atoms, 11(4), 68 (2023). https://doi.org/10.3390/atoms11040068
	Uzupełniająca lista lektur	M. Wróblewski, Metody numeryczne w fizyce, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2015 T. K. Kołodziejski, Fizyka współczesna w zadaniach obliczeniowych, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2016 B. Khriplovich, S.K. Lamoreaux, CP Violation Without Strangeness, Springer Berlin, Heidelberg 1997 P. Jönsson, M. Godefroid, G. Gaigalas, J. Ekman, J. Grumer, W. Li, J. Li, T. Brage, I.P. Grant, J. Bieroń, C.F. Fischer, An Introduction to Relativistic Theory as Implemented in GRASP, Atoms, 11(1), 7 (2023). https://doi.org/10.3390/atoms11010007
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Symulacje rozchodzenia się ciepła i propagacji fal elektromagnetycznych Jak można wykorzystać metody różnic skończonych (FDTD) i elementów skończonych (FEM) do modelowania przewodzenia ciepła w materiałach lub propagacji światła przez nanostruktury? Obliczenia kwantowo-mechaniczne struktur atomowych i molekularnych W jaki sposób obliczenia momentów dipolowych atomów i cząsteczek pozwalają badać łamanie symetrii (C, P, T) w fizyce współczesnej? Jak zaimplementować symulacje dynamiki molekularnej, rozwiązywać równania ruchu cząsteczek oraz modelować proste reakcje chemiczne w kontekście obliczeniowym?	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	