

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, Nowoczesne materiały i nanotechnologie - New

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie komputerowe w inżynierii materiałowej
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT NEW oIIS B5 21/22
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty podstawowe
LICZBA PUNKTÓW ECTS	4.00
SEMESTRY	1

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
1	30	0	0	30	0	0

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Cel przedmiotu 1 Zapoznanie studentów z zaawansowanymi metodami opisu rzeczywistości za pomocą modelowania matematyczno-komputerowego

Cel 2 Cel przedmiotu 2 Nabycie umiejętności przedstawiania przy pomocy środków multimedialnych reprezentacji własności badanych materiałów.

Cel 3 Cel przedmiotu 3 Nauczanie studentów tworzenia symulacji komputerowych typu Dynamika Molekularna i Monte Carlo.

Cel 4 Cel przedmiotu 4 WYROBIEŃCIE umiejętności prowadzenia samodzielnej analizy.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Wymaganie 1 Podstawowa umiejętność programowania w języku C lub CPP, znajomość programu Excel i Word.

2 Wymaganie 2 Wiadomości z zakresu fizyki i matematyki na poziomie studiów technicznych I stopnia

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Efekt kształcenia 1 Student zna zakres materiału według realizowanego programu

EK2 Umiejętności Efekt kształcenia 2 Student potrafi w przystępny, czytelny i estetyczny sposób przedstawiać różne zagadnienia z dziedziny nauki i techniki

EK3 Kompetencje społeczne Efekt kształcenia 3 Student potrafi upowszechniać i popularyzować osiągnięcia naukowo- techniczne

EK4 Umiejętności Efekt kształcenia 4 Student nabywa umiejętności tworzenia symulacji komputerowych typu Dynamika Molekularna i Monte Carlo

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Treści programowe 1 1. Wstęp. Omówienie metod symulacyjnych używanych do badania struktury mikroskopowej materiałów - metoda ab initio dla molekuł i małych układów, metoda Monte Carlo i dynamiki klasycznej dla dużych układów wielocząstkowych.	3

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W2	Treści programowe 2 1.Wprowadzenie do metody Dynamiki Molekularnej. Fizyka zderzeń dwóch obiektów: zderzenia binarne kul twardych - ruch translacyjny, oddziaływania elastyczne i nieelastyczne, zasada zachowania pędu i energii, kinematyka zderzenia twardych kul. Dynamika Molekularna typu Event Driven: pojęcie oraz tworzenie konfiguracji początkowej, losowanie położenia i prędkości, okresowe warunki brzegowe, przypadek dwu i trójwymiarowy. Działanie funkcji nint: definicja overlapu, skalowanie prędkości do zadanej temperatury, obliczanie energii systemu, zasada ekwipartycji energii, znajdowanie punktu oraz czasu kontaktu tj. punktu zderzenia, wektor czasu kolizji COLTIM[N], partner zderzenia PARTN[N], lista sąsiadów, procedury uaktualniania danych kinetycznych uplist and dnlist. Algorytmy różnic skończonych: metoda Eulera, Runge Kutty, Verleta, Beemana, porównanie sprawności metod, modele z potencjałami, potencjał Lennarda Jonesa, wybrane przykłady zastosowań: Model argonu. Adsorpcja gazów na powierzchni. Analiza statystyczna danych symulacyjnych: własności statyczne: rozkład Maxwella, radialne funkcje g, wpływ gęstości na funkcje g, parametry porządku, ciśnienie, ciepło właściwe, parametr ściśliwości etc., zastosowanie transformaty Fouriera do analizy symetrii dla 2D danych, własności dynamiczne: średnia droga kwadratowa, prędkościowe funkcje korelacji, współczynnik dyfuzji, lepkości. Dopasowanie funkcji ciągłych do danych pomiarowych: przybliżenie wielomianowe, przybliżenie Pade, Interpolacja funkcjami sklejanymi.	9
W3	Treści programowe 3 Układy molekularne anizotropowe a) Ruch bryły sztywnej: kąty Eulera, równania ruchu. Rotator. Dwie zderzające się igły na płaszczyźnie. Żyroskop. Kwaterniony w opisie ruchu obrotowego. Algebra kwaternionów. b) Ciekłe kryształy nematyczne w prostej teorii, program Mayera Saupe. Obliczanie parametrów porządku, teoria funkcjonalu gęstości (density functional theory) dla ciekłych kryształów. Teoria Onsagera dla nematyków, przypadek uniaksjalny i biaksjalny, korelacja wyników teoretycznych i symulacji komputerowych Optymalizacja: Równanie Eulera-Lagrange'a - Zastosowania, Metoda Rayleigha - Ritza: Równania samouzgodnione dla nematyka. Program dla Onsagera. Metoda najszybszego spadku. Metoda Newtona.	12
W4	Treści programowe 4 Przykłady symulacji wybranych materiałów stosowanych w inżynierii materiałowej. Potencjał Buckinghama i jego zastosowanie w badaniach szkieł. Przykładowe symulacje dla srebra, złota.	6

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Tworzenie dwuwymiarowych konfiguracji kul. Problem gęstego upakowania. Napisanie i przetestowanie podstawowego programu do dynamiki molekularnej typu sterowane zderzeniami oraz z zastosowaniem miękkiego potencjału typu Lennard Jones. Praktyczne zastosowanie algorytmów dynamiki molekularnej. Program Monte Carlo. Analiza konfiguracji oraz wielkości statystycznych i ich graficzna reprezentacja. Posługiwanie się programami OVITO, Nanotubemodeller, Avogadro, VMD.	30

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Narzędzie 1 Komputerowe ćwiczenia laboratoryjne

N2 Narzędzie 2 Wykład

N4 Narzędzie 4 Dyskusja

N5 Narzędzie 5 Praca w grupie

N6 Narzędzie 6 Prezentacje multimedialne

N7 Narzędzie 7 Zadania tablicowe

N8 Narzędzie 8 Konsultacje

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	60
Konsultacje przedmiotowe	20
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	40
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	0
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	120
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	4.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Ocena 1 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

F2 Ocena 2 Kolokwium

F3 Ocena 3 Egzamin

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Ocena 1 Egzamin pisemny

P2 Ocena 2 Średnia ważona ocen formujących: egzamin 40%, sprawozdania 30%, kolokwium 30%

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU

W1 Ocena 1 zaliczenie wszystkich elementów na oceny formujące z wynikiem pozytywnym.

OCENA AKTYWNOŚCI BEZ UDZIAŁU NAUCZYCIELA

B1 Ocena 1 Ocena ta nie jest wystawiana osobno, ale wpływ pracy studenta widoczny jest w elementach podlegających ocenom formującym, więc niejako są one również reprezentantem oceny aktywności własnej studenta

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	znajomość materiału niewystarczająca
NA OCENĘ 3.0	dostateczna znajomość materiału; ilość wykonanych projektów nie przekracza 60 %. Student zna wszystkie pojęcia, definicje z zakresu materiału. Ma zaliczone kolokwia na poziomie 3.
NA OCENĘ 3.5	więcej niż dostateczna znajomość materiału. Student z pytaniami naprowadzającymi odpowiada na wszystkie pytania z zakresu materiału i potrafi przeprowadzić rachunki. Ilość wykonanych zadań w zakresie 60% do 70%, czyli np. na 10 krótkich zadań, bezbłędnie i w terminie oddanych zostało 7.
NA OCENĘ 4.0	dobra znajomość materiału; dopuszczalny brak wykonania zadań na poziomie 20 %. W kolokwiach sprawdzających ocena wiedzy na 4.0.
NA OCENĘ 4.5	więcej niż dobra znajomość materiału; student swobodnie przedstawia analizy rachunkowe prezentując przy tym wiedzę teoretyczną; odpowiada merytorycznie na wszystkie pytania możliwe małe potknięcia, ma zaliczone wszystkie projekty i zadania do wykonania
NA OCENĘ 5.0	doskonała znajomość materiału zarówno części teoretycznej jak i umiejętności zastosowania wiedzy do analizy rozpatrywanych zagadnień
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Student nie potrafi przedstawić problemu czy zagadnienia
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi odpowiedzieć, ale przekaz jest mało komunikatywny i mało zrozumiały
NA OCENĘ 3.5	Student potrzebuje licznych informacji naprowadzających, by osiągnąć efekt
NA OCENĘ 4.0	Przekaz wymaga małych poprawek
NA OCENĘ 4.5	Przekaz zawiera wszystkie potrzebne elementy i jest zrozumiały i przejrzysty
NA OCENĘ 5.0	Bardzo dobra komunikatywność przekazu
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 2.0	Praca jest niewykonana
NA OCENĘ 3.0	Wykonanie prezentacji wymaga wielu podpowiedzi i poprawek. Brak pełnej samodzielności

NA OCENĘ 3.5	Prezentacje wykonane są samodzielnie , ale efekt pracy jest mało czytelny.
NA OCENĘ 4.0	Prezentacje wymagają niewielkich uzupełnień
NA OCENĘ 4.5	Prezentacje są treściwe i ładne.
NA OCENĘ 5.0	Praca studenta jest imponująca pod względem treści oraz walorów estetycznych
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Student nie umie pisać programów
NA OCENĘ 3.0	Część z wymaganych programów nie jest napisana (25%)
NA OCENĘ 3.5	Student napisał podstawowe procedury, ale nie panuje do końca nad ich funkcjonowaniem.
NA OCENĘ 4.0	Student wykonał programy, ale nie w terminie i potrzebował naprowadzających uwag
NA OCENĘ 4.5	Analiza danych statystycznych i animacje wymagają małych poprawek
NA OCENĘ 5.0	Programy zostały napisane w terminie i działają bezbłędnie, animacje są bardzo ładne.

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 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N1 N2 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK2		Cel 2 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N4 N5 N6 N7	F1 F2 F3 P1 P2
EK3		Cel 2 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N4 N5 N6	F1 F2 F3 P1 P2
EK4		Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 K1	N1 N2 N5 N6 N7 N8	P1 P2

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] Komentarz
- [2] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery — *Numerical Recipes*, Cambridge, 2007, Cambridge University Press
- [3] M. Allen, D.J. Tildesley — *Computer Simulation of liquids*, Oxford, 1987, Clarendon
- [4] N. Gershenfeld — *Mathematical Modeling*, Cambridge, 1999, Cambridge University Press
- [5] Agnieszka Chrzanowska — *MOdelowanie Komputerowe skrypt*, Miejscość, 2019, Wydawnictwo

LITERATURA DODATKOWA

- [1] B. Kozarzewski — *Uczelnianie notatki skryptowe (autor B. Kozarzewski)*, Kraków, 0, Wydawnictwo
- [2] Autor — *Tytuł*, Miejscość, 2019, Wydawnictwo

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. Agnieszka Chrzanowska (kontakt: agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 Tytuł Agnieszka Chrzanowska (kontakt: agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....