

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2020/2021

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: II

Specjalności: Fizyka medyczna, Komputerowa analiza obrazu i sygnału, Nowoczesne materiały i nanotechnologie, Modelowanie komputerowe, Technologie multimedialne

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie komputerowe
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Computer Modeling
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT oIIS C7 20/21
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty kierunkowe
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 cech problemu.

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

Cel 4 Cel przedmiotu 4 Wyrobienie 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.Dynamika układów molekularnych. Fizyka zderzeń makroskopowych: 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, Verlet, 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.	15

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W2	Treści programowe 2 1.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 nematiczne w prostej teorii, program Mayera Saupe. Obliczanie parametrów porządku, teoria funkcjonału gęstości (density functional theory) dla ciekłych kryształów. Teoria Onsagera dla nematyków, przypadek uniaksjalny i biaksjalny, korelacja wyników teoretycznych i symulacji komputerowych. 2. Modele zjawisk fizycznych opisywanych równaniami cząstkowymi: drgania membrany. Równanie opisujące drgania. Metoda rozwiązywania.Funkcje Bessela. Mody drgań: przewodzenie ciepła wewnątrz materiału. Ostyganie jednorodnej kuli. 3.Optymalizacja: Równanie Eulera-Lagrange'a - Zastosowania, Metoda Rayleigha - Ritza: Równania samouzgodnione dla nematyka. Program dla Onsagera. Metoda najszybszego spadku. Metoda Newtona. Nematyk z polem elektrycznym. 4. Dopasowanie do danych pomiarowych: przybliżenie wielomianowe, przybliżenie Pade, Interpolacja funkcjami sklejanymi.	15

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Treści programowe 1 Zastosowania biblioteki allegro do graficznej reprezentacji układów fizycznych Wprowadzenie Jak korzystać z biblioteki allegro wraz z przykładami podstawowych instrukcji rysowania figur i innych elementów. Tworzenie statycznych obrazów. Rola funkcji blit. Tworzenie dwuwymiarowych konfiguracji kul. Problem gęstego upakowania. Przykłady: ruch oscylacyjny. Wahadło lub sprężyna - przykład ruchu drgającego swobodnego i z uwzględnieniem tarcia, rzut ukośny. Rzut ukośny z tarcie. Z dużym tarcie, zderzenie dwóch solitonów, w fazie i w antyfazie. Deska Galtona, błędzenie przypadkowe, motyl Lorentza jako przykład chaosu deterministycznego, fraktale, inne. Napisanie i przetestowanie podstawowego programu do dynamiki molekularnej typu sterowane zderzaniem oraz z zastosowaniem miękkiego potencjału typu Lennard Jones. Program Monte Carlo. Analiza konfiguracji oraz wielkości statystycznych i ich graficzna reprezentacja.	30

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Narzędzie 1 Ćwiczenia laboratoryjne

N2 Narzędzie 2 Wykład

N3 Narzędzie 3 Projekt indywidualny

N4 Narzędzie 4 Dyskusja

N5 Narzędzie 5 Praca w grupie

N6 Narzędzie 6 Prezentacje multimedialne

N7 Narzędzie 7 Zadania tablicowe

N8 Narzędzie 8 Konsultacje

N9 Narzędzie 9

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	10
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	50
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 Projekt indywidualny

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Ocena 1 Egzamin pisemny

P2 Ocena 2 Średnia ważona ocen formujących

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	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	K_W01b K_W03 K_W05 K_W06 K_W07b K_W09b K_W10 K_W12 K_U01b	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 K1	N1 N2 N3 N7	F1 F2 F3 P1 P2
EK2	K_U01b K_U02 K_U03b K_U04b K_U07b K_U08b K_U09 K_U10b K_U11 K_U12 K_U16b	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 K1	N4 N5 N7	F1 F2
EK3	K_K01 K_K02 K_K04	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 K1	N4 N5 N6 N7 N8 N9	P1 P2
EK4	K_U01b K_U02 K_U03b K_U04b K_U07b K_U08b K_U09 K_U10b K_U11 K_U14 K_U15 K_U16b	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 K1	N1 N3 N8	P1 P2

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] **D.Frenkel,B.Smit** — *Understanding Molecular Simulations*, SanDiego, 2002, Academic Press
- [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*, Miejscowość, 2019, Wydawnictwo

LITERATURA DODATKOWA

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

.....