

# 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 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
<b>W1</b>	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	<p>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 <math>\text{min}</math>: 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 <math>\text{update}</math> and <math>\text{dnlst}</math>. 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 <math>g</math>, wpływ gęstości na funkcje <math>g</math>, 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.</p>	9
W3	<p>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 nematiczne 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.</p>	12
W4	<p>Treści programowe 4 Przykłady symulacji wybranych materiałów stosowanych w inżynierii materiałowej. Potencjał Buckinghama i jego zastosowanie w badaniach szkieł. Przykładowe symulacje dla srebra, złota.</p>	6

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	<p>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.</p>	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
<b>Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:</b>	
Godziny wynikające z planu studiów	60
Konsultacje przedmiotowe	20
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
<b>Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:</b>	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	40
Opracowanie wyników	0
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	0
<b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>	<b>120</b>
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	K_W01 K_W02b K_W03 K_W05 K_W07b K_W09b K_W10	Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N1 N2 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK2	K_W01 K_W02b K_W03 K_W05 K_W07b K_W08 K_W09b K_W10 K_W11 K_W12	Cel 2 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N4 N5 N6 N7	F1 F2 F3 P1 P2

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK3	K_K01 K_K02 K_K03 K_K04	Cel 2 Cel 4	W1 W2 W3 W4 K1	N4 N5 N6	F1 F2 F3 P1 P2
EK4	K_U02 K_U03b K_U04b K_U07b K_U08b K_U09 K_U10b K_K04	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** — *MÓdelowanie 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](mailto:agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl))

### OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 Tytuł Agnieszka Chrzanowksa (kontakt: [agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl](mailto: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)

.....