

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2023/2024

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna w Języku Angielskim

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FTja

Stopień studiów: II

Specjalności: Computer modelling (modelowanie komputerowe w języku angielskim)

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Computer modeling
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Computer modeling
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FTJA oHS C7 23/24
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 Target 1: To present and teach students of advanced methods of physical phenomena description by means of the computer and mathematical modeling.

Cel 2 Cel przedmiotu 2 Target 2: Developing skills to present typical features of physical problems by different multimedia tools

Cel 3 Cel przedmiotu 3 Target 3: Developing operating skill cognition.

Cel 4 Cel przedmiotu 4 Target 4: Enhancing level of learning satisfaction during the learning process.

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Wymaganie 1 Skills and Competences 1 Knowledge on mathematics and physics at the level of first grade university studies

2 Wymaganie 2 Skills and Competences 2 Basic knowledge in programming in C/CPP language and of plotting programs

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Efekt kształcenia 1 K_W09b Wiedza has advanced and systematised knowledge in the domain of modern computer physics applied in modelling subatomic, molecular, mesoscopic and macroscopic phenomena P7U_W

EK2 Kompetencje społeczne Efekt kształcenia 2 K_K04 has awareness of social significance of natural and technical science, is able to evaluate critically information on this issue and can contribute to improving technical education in the society P7U_K

EK3 Umiejętności Efekt kształcenia 3 K_U04b can prepare and present documented elaborations, written expert evaluation and multimedia presentations, in Polish and English, on specific issues in physics and technology, also for international symposia P7U_U

EK4 Umiejętności Efekt kształcenia 4 K_U02 Umiejętności is able to communicate in professional context by means of various information and communication techniques with representatives of selected faculty of technical physics and business partners (also in English or any other foreign language) P7U_U

6 TREŚCI PROGRAMOWE

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	Treści programowe 1 Program for finding distribution functions for a nematic liquid crystal. Analysis of the obtained results.	8
K1	Treści programowe 1 Program for finding distribution functions for a nematic liquid crystal. Analysis of the obtained results.	21
K2	Treści programowe 2 Analysis of the solutions obtained with Wolfram Mathematica.	1

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Treści programowe 1 Diversity of multibody systems. Basic principles of large body interactions - hard core interactions and dissipative interactions (elastic and inelastic). Binary collisions of two spheres. Momentum and energy conservation laws. Collision of simple anisotropic bodies - two needles. Types of Molecular Dynamics - genuine and Event Driven dynamics. Initial configurations and initial kinetic properties. Periodic boundary conditions for different geometries. The role of function nint. Equipartition of energy principle. Energy scalings. Fundamental procedures of Event Driven programme. Collision partner PARTNR[I], time of collision COLTIM[i], update functions dnlst() and uplist(). Neighbour lists and overalps. MD algorithms. Verlet alg., Runge Kutta alg, Runge Kutta Fehlberg alg., Beeman algorithm. Isotropic and anisotropic soft interaction potentials. Gay-Berne and Ruyjgrok potentials for description of liquid crystals. 2D model of the Lennard Jones disks. Statistical analysis of the MD results. Configurational properties. Density profile histogram. Radial distribution function $g(r)$. Structure factors. Maxwell distribution of velocities. Pressure. Specific heat. Order parameters. Application of the Fourier transform to the analysis of 2D results. On the calculation of the dynamics properties: mean square displacement, diffusivities and velocity correlation. Viscosity and the types of viscosities. Introduction to LAMMPS MD programming.	14
W2	Treści programowe 2 Anisotropic systems: simulations and theories. Description of a three-dimensional hard body movement. Euler angles. Velocities in the body frame. Equations of motion. Inertness. Deriving the tensor of the moment of inertness. Some examples of tensor inertness for different geometrical objects. Gyroscope. Algebra of quaternions in description of body rotations. Optimisation problems and techniques of finding the state of an anisotropic particles or objects. Euler-Lagrange equations. Minimisation of the free energy functional. Relaxation method. Applications- Simple theories of nematic liquid crystals. Mayer Saupe and Onsager theory. Uniaxial and biaxial case. Solving self consistency equations. Calculating order parameters. Finding equation of state. Why to use the order parameter tensor.	12
W3	Treści programowe 3 Some example of physical phenomena described by partial differential; equations: vibrations of a two-dimensional membrane - equations of motions and solving methods. Heat transfer within a material - cooling sphere. Solving Langevin equation and diffusion equation.	4

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Narzędzie 1 Lectures

N2 Narzędzie 2 Computer Laboratory

N3 Narzędzie 3 Group Discussion

N4 Narzędzie 4 Consultation

N5 Narzędzie 5 Individual Project Discussion

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	15
Opracowanie wyników	15
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	15
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	125
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	4.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Ocena 1 Active work during computer laboratory hours

F2 Ocena 2 Written reports from the class tasks

F3 Ocena 3 Final exam results

F4 Ocena 4 Attendance during lectures

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 taken as an average of the partial components

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Student knows less than 50% of the required
NA OCENĘ 3.0	Student knows at least 50 % of the required information and less than 60%
NA OCENĘ 3.5	Student knows at least 60 % of the required information and less than 70%
NA OCENĘ 4.0	Student knows at least 70 % of the required information and less than 80%

NA OCENĘ 4.5	Student knows at least 80 % of the required information and less than 90%
NA OCENĘ 5.0	Student knows at least 90 % of the required information
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Student is unaware of the subject importance
NA OCENĘ 3.0	not available
NA OCENĘ 3.5	not available
NA OCENĘ 4.0	not available
NA OCENĘ 4.5	not available
NA OCENĘ 5.0	Students can provide convincing and reasonable arguments
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	
NA OCENĘ 2.0	Student submitted less than 50 % of the needed reports and they are of bad quality
NA OCENĘ 3.0	Student submitted at least 60% of the needed reports and less than 70 % which are clearly written and comprehensive
NA OCENĘ 3.5	Student submitted 70% of the needed reports and less than 80 % which are clearly written and comprehensive
NA OCENĘ 4.0	Student submitted at least 80% of the needed reports and less than 90% which are clearly written and comprehensive
NA OCENĘ 4.5	Student submitted all the needed reports which are clearly written and comprehensive, but contain minor errors
NA OCENĘ 5.0	Student submitted all the needed reports which are clearly written and comprehensive
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Student cannot communicate on the given subject
NA OCENĘ 3.0	not available
NA OCENĘ 3.5	not available
NA OCENĘ 4.0	not available
NA OCENĘ 4.5	not available
NA OCENĘ 5.0	Student communications skills are satisfactory

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	K1 K1 K2 W1 W2 W3	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 F3 F4 P1
EK2		Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	K1 K1 K2 W1 W2 W3	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 F3 F4 P1
EK3		Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	K1 K1 K2 W1 W2 W3	N1 N2 N3 N4 N5	F1 F2 F3 F4 P1
EK4		Cel 1 Cel 2 Cel 3 Cel 4	K1 K1 K2 W1 W2 W3	N1 N2 N3 N4	F1 F2 F3 F4 P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] **D.Frenkel,B.Smitt** — *Understanding Molecular Simulations*, San Diego, 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

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] **W.I. Arnold** — *Równania różniczkowe zwyczajne*,, Warszawa, 1975, PWN

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

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

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

- 1 dr hab. 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)

.....