

# POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

## KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2012/2013

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Fizyka techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: II

Specjalności: Modelowanie komputerowe, Fizyka fazy skondensowanej, Technologie multimedialne, Nowoczesne materiały i nanotechnologie

### 1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie komputerowe
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	
KOD PRZEDMIOTU	WFMiI FT oIIS C7 12/13
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** Zapoznanie studentów z zaawansowanymi metodami opisu rzeczywistości za pomocą modelowania matematyczno-komputerowego

**Cel 2** Nabycie umiejętności przedstawiania przy pomocy środków multimedialnych reprezentacji cech problemu.

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

Cel 4 Wyrobienie umiejętności prowadzenia samodzielnej analizy.

#### 4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

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

#### 5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

**EK1 Wiedza** Student zna zakres materiału według realizowanego programu

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

**EK3 Kompetencje społeczne** Student potrafi upowszechniać i popularyzować osiągnięcia naukowo- techniczne

**EK4 Umiejętności** 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	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 położeń i prędkości, okresowe warunki brzegowe, przypadek dwu i trójwymiarowy. Działanie funkcji <code>next</code> : definicja <code>overlap</code> , skalowanie prędkości do zadanej temperatury, obliczanie energii systemu, zasada ekwipartycji energii, znajdowanie punktu oraz czasu kontaktu tj. punktu zderzenia, wektor czasu kolizji <code>COLTIM[N]</code> , partner zderzenia <code>PARTN[N]</code> , lista sąsiadów, procedury uaktualniania danych kinetycznych <code>update</code> and <code>dnlist</code> . Algorytmy różnic skończonych: metoda Eulera, Runge Kuty, 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 <code>g</code> , wpływ gęstości na funkcje <code>g</code> , 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
<b>W2</b>	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. Ostygnięcie 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
<b>K1</b>	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 zderzeniami 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** Ćwiczenia laboratoryjne

**N2** Wykłady

**N3** Ćwiczenia projektowe

**N4** Dyskusja

**N5** Praca w grupach

**N6** Prezentacje multimedialne

N7 Zadania tablicowe

N8 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	0
Konsultacje przedmiotowe	10
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	20
Opracowanie wyników	20
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
<b>SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA</b>	<b>60</b>
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	4.00

## 9 SPOSOBY OCENY

### OCENA FORMUJĄCA

F1 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

F2 Kolokwium

F3 Projekt indywidualny

### OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Egzamin pisemny

P2 Średnia ważona ocen formujących

### KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	znajomość materiału niewystarczająca,
NA OCENĘ 3.0	dostateczna znajomość materiału oszacowana procentowo w przedziale 50%-60%

NA OCENĘ 3.5	więcej niż dostateczna znajomość materiału oszacowana procentowo w przedziale 60%-70%
NA OCENĘ 4.0	dobra znajomość materiału oszacowana procentowo w przedziale 70%-80%
NA OCENĘ 4.5	więcej niż dobra znajomość materiału oszacowana procentowo w przedziale 80%-90%
NA OCENĘ 5.0	znajomość materiału oszacowana powyżej 90 %
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Nie potrafi przedstawić problemu czy zagadnienia
NA OCENĘ 3.0	Przekaz jest mało komunikatywny i mało zrozumiały
NA OCENĘ 3.5	Student potrzebuje 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 napisał 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_W02, K_W04, K_W05, K_W08, K_U01, K_U02, K_U03, K_U04, K_U07, K_U08, K_U09, K_U10	Cel 1	W2 K1	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK2	K_U01, K_U02, K_U03, K_U04, K_U07, K_U08, K_U09, K_U10	Cel 4	W2 K1	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK3	K_U01, K_U02, K_U03, K_U04, K_U07, K_U08, K_U09, K_U10	Cel 2	W2 K1	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F3 P2
EK4	K_W01, K_W02, K_W04, K_W05, K_W08, K_U01, K_U02, K_U03, K_U04, K_U07, K_U08, K_U09, K_U10, K_K01, K_K02, K_K03, K_K05, K_K04	Cel 3	W2 K1	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F3 P2

## 11 WYKAZ LITERATURY

### LITERATURA PODSTAWOWA

- [1 ] **D.Frenkel,B.Smit** — *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

[2 ] **E. Beltrami** — *Mathematics for Dynamic Modeling*, New York, 1998, Academic Press

#### LITERATURA DODATKOWA

[1 ] Uczelnianie notatki skryptowe (autor B. Kozarzewski)

[2 ] Uzupełnienie do notatek skryptowych B. Kozarzewskiego, Agnieszka Chrzanowska

[3 ] Zastosowanie biblioteki allegro do prezentacji graficznych i animacji - Paweł Karbowniczek,

[4 ] Ciekłe kryształy -Gabriela Lewińska

## 12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

### OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. Agnieszka Chrzanowska (kontakt: [admin@pellegrina.strefa.pl](mailto:admin@pellegrina.strefa.pl))

### OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. Agnieszka Chrzanowska (kontakt: [admin@pellegrina.strefa.pl](mailto:admin@pellegrina.strefa.pl))

## 13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

---

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

**PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI** (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....