

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2013/2014

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Fizyka techniczna

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT

Stopień studiów: II

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

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Modelowanie komputerowe
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Computer Modelling
KOD PRZEDMIOTU	WFMiI FT oIIS C7 13/14
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

LABORATORIUM KOMPUTEROWE		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
K1	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, błądzenie 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

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN

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 $nint$: 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 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 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
W2	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 nematyczne 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 - Ritz'a: 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

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
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	20
Opracowanie wyników	20
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
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 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; 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 o 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 kolokwium sprawdzającym 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	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_W03 K_W05 K_W09 K_U03 K_U08 K_U16 K_K01	Cel 1	K1 W2	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK2	K_U01 K_U04 K_U07 K_U08 K_U15 K_U16	Cel 4	K1 W2	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F2 F3 P1 P2
EK3	K_U02 K_U04 K_U06	Cel 2	K1 W2	N1 N2 N3 N4 N5 N6 N7 N8	F1 F3 P2
EK4	K_U07 K_U08	Cel 3	K1 W2	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)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. Agnieszka Chrzanowska (kontakt: 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)

.....