



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Wybrane zagadnienia z modelowania materiałów i symulacji procesów fizycznych [S1ETI2>WZzMMiSPF]

Przedmiot

Kierunek studiów

Edukacja techniczno-informatyczna

Rok/Semestr

3/5

Studia w zakresie (specjalność)

–

Profil studiów

ogólnoakademicki

Poziom studiów

pierwszego stopnia

Język oferowanego przedmiotu

polski

Forma studiów

stacjonarne

Wymagalność

obieralny

Liczba godzin

Wykład

15

Laboratorium

15

Inne

0

Ćwiczenia

0

Projekty/seminaria

0

Liczba punktów ECTS

2,00

Koordynatorzy

Wykładowcy

Wymagania wstępne

Wiedza z fizyki klasycznej i kwantowej, chemii oraz matematyki w zakresie realizowanym na kierunku edukacja technicznoinformatyczna. Umiejętność rozwiązywania prostych problemów w oparciu o posiadaną wiedzę i umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł. Umiejętność programowania proceduralnego.

Cel przedmiotu

1. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy i umiejętności w zakresie modelowania i symulacji. 2. Rozwijanie u studentów umiejętności analizy jakościowej i ilościowej zjawisk fizycznych, z wykorzystaniem symulacji komputerowych.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:

W wyniku przeprowadzonych zajęć student zna i rozumie:

podstawowe metody modelowania molekularnego wykorzystujące zasady fizyki kwantowej metodologię symulacji komputerowych

podstawowe definicje i klasyfikację automatów komórkowych wg Wolframa

przykładowe reguły automatów komórkowych umożliwiające symulację w różnych dziedzinach

Umiejętności:

W wyniku przeprowadzonych zajęć student potrafi:

poprawnie wykorzystać standardowe narzędzia analityczne, w tym numeryczne i obliczeniowe, do rozwiązywania szczegółowych problemów fizycznych i technicznych; potrafi krytycznie ocenić wyniki takiej analizy

wybrać odpowiednią metodę modelowania do poprawnego opisu materiału i procesu fizycznego, a

także ustalić niezbędne zasoby komputerowe do wykonania zadania obliczeniowego

zaimplementować wybraną prostą i złożoną regułę automatu komórkowego i zasymulować

(zwizualizować) proces, który reguła imituje

w sposób zwarty opisać uzyskane wyniki symulacji odnieść je do zachowań rzeczywistych układów

Kompetencje społeczne:

W wyniku przeprowadzonych zajęć student zdobędzie niżej wymienione kompetencje społeczne:

potrafi odpowiedzialnie pracować nad wyznaczonym zadaniem samodzielnie oraz w zespole, przyjmując w nim różne role

rozumie potrzebę i zna możliwości ciągłego dokształcania się (studia pierwszego i drugiego stopnia, studia podyplomowe) - podnoszenie kompetencji zawodowych, osobistych i społecznych

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Forma oceny Kryteria oceny

Kolokwium pisemne

Projekt indywidualny, sprawozdanie, aktywność

100% - 90% (5.0)

80% - 89% (4.5)

70% - 79% (4.0)

60% - 69% (3.5)

50% - 59% (3.0)

0% - 49% (2.0)

Treści programowe

Uczestnicy poznają: metody modelowania i symulacji cząsteczek i materiałów w skali atomowej oraz zastosowanie automatów komórkowych w symulacjach komputerowych.

Tematyka zajęć

Część A.

1. Wprowadzenie do modelowania i symulacji komputerowych,

2. Modele kwantowe cząsteczek; konstrukcja i rozwiązywanie równania Schrodingera; równanie Kohna-Shama, problem opisu układów wieloelektronowych.

3. Współczesne metody modelowania materiałów w skali atomowej oparte na teorii funkcjonału gęstości elektronowej

Część B.

1. Wprowadzenie do techniki automatów komórkowych: definicja, klasyfikacja i przykłady.

2. Zastosowanie automatów komórkowych w fizyce magnetyzmu (model Isinga), fizyce powierzchni (modelowanie wzrostu warstw), biofizyce (model Penny), socjofizyce (formowanie i dynamika opinii publicznej) i chemii (modelowanie reakcji katalitycznych).

3. Zastosowanie automatów komórkowych w problemach transportu: gaz sieciowy, materiały granulowane, modele ewakuacji i zatory uliczne.

4. Zastosowanie automatów komórkowych: fraktale, agregacja ograniczona przez dyfuzję, pożary lasów.

Metody dydaktyczne

1. Wykład konwersatoryjny: prezentacja multimedialna, pokazy symulacji.

2. Ćwiczenia laboratoryjne: przeprowadzanie modelowania i symulacji komputerowych, indywidualne projekty, dyskusja, praca w zespołach.

Literatura

Podstawowa:

1. Materiały z wykładów (po polsku)
2. Materials Modelling using Density Functional Theory, Giustino Feliciano, Oxford University Press
3. K. Kułakowski, Automaty komórkowe, OEN AGH (2000)
4. S. Wolfram, A New Kind of Science, Wolfram Media (2002)

Uzupełniająca:

1. A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wolfram Koch, Max C. Holthausen, Wiley
2. D. Stauffer i inni, Biology, Sociology, Geology by Computational Physicists, Elsevier (2006)
3. D.P. Landau, K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press (2005)

Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	55	2,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	30	1,00
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu)	25	1,00