

1.	<b>Nazwa kierunku</b>	<b>fizyka techniczna</b>
2.	Cykl rozpoczęcia	2017/2018 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia (inżynierskie)
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

**Moduł kształcenia:**           Komputerowe metody symulacji

**Kod modułu:** 0305-1FT-17-57

**1. Liczba punktów ECTS:** 4

<b>2. Zakładane efekty kształcenia modułu</b>			
<b>kod</b>	<b>opis</b>	<b>efekty kształcenia kierunku</b>	<b>stopień realizacji (skala 1-5)</b>
1FT_57_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metod Monte Carlo	KFT_W08	5
1FT_57_2	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych.	KFT_W08	5
1FT_57_3	Zna metody rozwiązywania równań różniczkowych na siatkach.	KFT_W08	5
1FT_57_4	Potrafi napisać implementacje procedur w symulacjach komputerowych dynamiki molekularnej lub Monte Carlo.	KFT_U11	4
1FT_57_5	Potrafi rozwiązać zagadnienie przepływu lub transportu stosując jedną z prezentowanych metod.	KFT_U09	4

<b>3. Opis modułu</b>	
<b>Opis</b>	<p>Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Klasyczne symulacje komputerowe – oddziaływania między-atomowe; modele cząsteczek; periodyczne warunki brzegowe; konwencja najbliższych obrazów; obcięcie sferyczne.</li> <li>-Symulacja dynamiki molekularnej: równania ruchu Newtona dla układów atomów, metody rozwiązywania równań różniczkowych, symulacja sztywnych molekuł – opis ruchu rotacyjnego i rozwiązywanie równań ruchu; dynamika z więzami – algorytm SAKE, konfiguracja początkowa, eliminacja pędu całkowitego układu, jednostki zredukowane, parametry kontrolne w etapie dochodzenia układu do równowagi, siły i przesunięty potencjał, oddziaływania dalekiego zasięgu, metoda sumowania Ewalda, ładunki ułamkowe w cząsteczkach dipolowych, proste średnie termodynamiczne (energia, temperatura, ciśnienie), transformacja wartości średnich między zespołami statystycznymi, ciepło właściwe. Własności strukturalne (dwójkowa funkcja rozkładu, statyczny czynnik struktury), daleko-zasięgowe poprawki energii potencjalnej i ciśnienia, czasowe funkcje korelacji, czasy korelacji i współczynniki transportu, dynamika molekularna dla różnych zespołów statystycznych.</li> <li>-Stochastyczne symulacje komputerowe: metody Monte Carlo dla różnych zespołów statystycznych.</li> <li>-Praktyczny wstęp do symulacji ośrodków ciągłych (cieczy i ośrodków sprężystych). Metody rozwiązywania równań różniczkowych na siatkach</li> </ul>

	<p>(FDM,FEM,FVM). Metody cząsteczkowe. Rozwiązywanie równań transportu.</p> <p>W trakcie zajęć laboratoryjnych( tematy ćwiczeń laboratoryjnych do wyboru) poznana na wykładach wiedza wykorzystana będzie do opracowania projektu obejmującego program symulacji dynamiki molekularnej lub Monte Carlo układu atomów oraz rozwiązanie zagadnienia przepływu lub transportu.</p> <p>Przedmiot obowiązkowy w semestrze 5 dla specjalności Nowoczesne materiały i techniki pomiarowe; wykład zakończony egzaminem.</p>
<b>Wymagania wstępne</b>	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej i fizyki statystycznej, znajomość języków programowania (Fortran, C/C++)

#### 4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu

kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
1FT_57_w_1	projekt	Podstawą zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest projekt mający na celu uruchomienie programu symulacji dynamiki molekularnej lub Monte Carlo układu atomów oraz rozwiązanie zagadnienia przepływu lub transportu	1FT_57_4, 1FT_57_5
1FT_57_w_2	egzamin ustny	Trzy pytania z zagadnień wykładu (symulacje dynamik molekularnej i Monte Carlo oraz metod rozwiązywania równań różniczkowych) Egzamin obowiązkowy dla sp. Nowoczesne materiały i techniki pomiarowe w semestrze 5.	1FT_57_1, 1FT_57_2, 1FT_57_3

#### 5. Rodzaje prowadzonych zajęć

kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
1FT_57_fs_1	wykład	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej.	15	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca	30	1FT_57_w_2
1FT_57_fs_2	laboratorium	Opracowanie projektu	30	Przyswojenie wiedzy z wykładów.	20	1FT_57_w_2