

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu:	Projektowanie materiałów i komputerowa nauka o materiałach				
Rok akademicki:	2012/2013	Kod:	CCB-1-406-s	Punkty ECTS:	6
Wydział:	Inżynierii Materiałowej i Ceramiki				
Kierunek:	Chemia Budowlana	Specjalność:	—		
Poziom studiów:	Studia I stopnia	Forma i tryb studiów:	Stacjonarne		
Język wykładowy:	Polski	Profil kształcenia:	Ogólnoakademicki (A)	Semestr:	4
Strona www:	—				
Osoba odpowiedzialna:	dr hab. inż. Filipek Robert (rof@agh.edu.pl)				
Osoby prowadzące:	dr hab. inż. Filipek Robert (rof@agh.edu.pl) dr inż. Kucza Witold (witek@agh.edu.pl) dr hab. inż. Tkacz-Śmiech Katarzyna (smiech@agh.edu.pl)				

Opis efektów kształcenia dla modułu zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Powiązania z EKK	Sposób weryfikacji efektów kształcenia (forma zaliczeń)
Wiedza			
M_W001	Ma wiedzę z zakresu projektowania materiałów i procesów z zastosowaniem komputerowego wspomaganie, wykorzystywania baz danych oraz specjalistycznego oprogramowania	CB1A_W04	Kolokwium, Egzamin
M_W002	Ma podstawową wiedzę w zakresie modelowania matematycznego wymiany ciepła w procesach technologicznych.	CB1A_W07	Aktywność na zajęciach, Kolokwium, Egzamin
Umiejętności			
M_U001	Potrafi wykorzystać poznane metody i modele matematyczno-fizyczne do opisu i wyjaśniania zjawisk i procesów chemicznych oraz ocenić ich przydatność. Potrafi modyfikować istniejące i projektować nowe materiały budowlane pod kątem wybranych właściwości z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania	CB1A_U08, CB1A_U11	Aktywność na zajęciach, Kolokwium, Egzamin, Zaliczenie laboratorium
Kompetencje społeczne			

M_K001	Ma świadomość własnych ograniczeń i wie, kiedy zwrócić się do ekspertów w zagadnieniach modelowania materiałów i procesów	CB1A_K02	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Zaangażowanie w pracę zespołu, Prezentacja, Egzamin
--------	---	----------	--

Matryca efektów kształcenia w odniesieniu do form zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Forma zajęć										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Inne	E-learning
Wiedza												
M_W001	Ma wiedzę z zakresu projektowania materiałów i procesów z zastosowaniem komputerowego wspomaganie, wykorzystywania baz danych oraz specjalistycznego oprogramowania	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
M_W002	Ma podstawową wiedzę w zakresie modelowania matematycznego wymiany ciepła w procesach technologicznych.	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
Umiejętności												
M_U001	Potrafi wykorzystać poznane metody i modele matematyczno-fizyczne do opisu i wyjaśniania zjawisk i procesów chemicznych oraz ocenić ich przydatność. Potrafi modyfikować istniejące i projektować nowe materiały budowlane pod kątem wybranych właściwości z wykorzystaniem specjalistycznego oprogramowania	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne												
M_K001	Ma świadomość własnych ograniczeń i wie, kiedy zwrócić się do ekspertów w zagadnieniach modelowania materiałów i procesów	-	-	+	-	-	+	-	-	-	-	-

Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

Modelowanie fenomenologiczne

Pojęcie ośrodka ciągłego; Równania zachowania masy, energii i pędu – przypadek ewolucyjny i stacjonarny; Ogólna postać praw zachowania; Równania konstytutywne, warunki początkowe i brzegowe; Transport masy w układach wieloskładnikowych; Transport ciepła w materiale wielofazowym; Problemy Stefana – zagadnienia z poruszającą się granicą i swobodnym brzegiem; Wzrost faz międzymetalicznych w procesie lutowania dyfuzyjnego.

Metody numeryczne

Przybliżone metody rozwiązywania zagadnień początkowo-brzegowych; Metoda różnic skończonych; Metoda linii; Metoda elementów skończonych; Podstawy dyskretyzacji przestrzeni z użyciem metody elementów skończonych; Metoda Galerkin; Przykłady rozwiązań dla problemów transportu masy i energii w geometrii jedno-, dwu i/lub trójwymiarowej.

Projektowanie materiałowe w projektowaniu inżynierskim, metody wytwarzania i projektowania

Projektowanie produktów i procesów ich wytwarzania; Metodyka projektowania materiałowego – elementy i fazy projektowania inżynierskiego; Wykresy doboru materiałów; Oprogramowanie CES EduPack; Projektowanie wielokryterialne; Wpływ metod wytwarzania na projektowanie; Wykresy wspomagające wybór metody wytwarzania; Czynniki funkcjonalne i zagadnienia jakości wytwarzania produktów; Czynniki socjologiczne, ekologiczne i ekonomiczne w projektowaniu inżynierskim. Źródła informacji o materiałach inżynierskich, narzędzia wspomagające projektowanie inżynierskie

Książkowe źródła danych; Komputerowe bazy danych o materiałach inżynierskich; Systemy eksperckie; Sposoby weryfikacji i walidacji danych; Metody sztucznej inteligencji w modelowaniu, symulacji i predykcji struktury i własności materiałów inżynierskich; Przegląd specjalistycznego oprogramowania do projektowania materiałów inżynierskich.

Modelowanie w skali atomowej i wieloskalowe – wprowadzenie

Metoda Monte-Carlo; Dynamika Molekularna; Teoria Funkcjonału Gęstości; Automaty komórkowe

Ćwiczenia laboratoryjne

Student w trakcie ćwiczeń w laboratorium komputerowym wykona dwa projekty.

Przykładowa lista tematów projektów:

Projektowanie materiałów odpornych na korozję

Modelowanie diagramów fazowych

Projektowanie materiałów gradientowych

Projektowanie materiałów na membrany jonoselektywne

Projektowanie materiałów gradientowych w warunkach ekstremalnie wysokich pól grawitacyjnych

Projektowanie materiałów o zadanych właściwościach fizyko-chemicznych

Projektowanie procesu formowania mas ceramicznych

Modelowanie transportu ciepła w materiałach wielofazowych

Zagadnienia odwrotne w projektowaniu materiałów

Zajęcia seminaryjne

Metody rozwiązywania układów równań liniowych; Metody rozwiązywania zagadnień początkowych Cauchy'ego; Metoda różnic skończonych dla zagadnień stacjonarnych; Metoda różnic skończonych dla zagadnień niestacjonarnych; Metoda linii; Metoda Galerkin; Zastosowania dla wybranych przykładów.

Wykorzystanie oprogramowania CES EduPack do projektowania inżynierskiego: dobór

materiałów i dobór metod wytwarzania.

Wybrane pakiety obliczeniowe: ANSYS, Comsol, Mathematica, MathCad, Matlab; Excel & Visual Basic for Applications; Przykłady obliczeń

Sposób obliczania oceny końcowej

Podstawą oceny przedmiotu jest średnia ocena z egzaminu, seminarium i laboratorium z następującymi wagami: 0.5, 0.25 i 0.25. Oceny z seminarium oraz laboratorium uwzględniają wyniki kolokwium, wygłoszony referat/oceny z projektów oraz ocenę za aktywność studenta na zajęciach.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Kursy: Informatyka, Nauka o materiałach

Zalecana literatura i pomoce naukowe

1. M. Ashby, H. Shercliff, D. Cebon, Inżynieria materiałowa. Tom 1, Galaktyka 2011.
2. M. Ashby, H. Shercliff, D. Cebon, Inżynieria materiałowa. Tom 2, Galaktyka 2011.
3. R. Filipek, K. Szyszkiewicz-Warzecha, Metody matematyczne dla Ceramików
4. M. Ashby, Materials and the Environment: Eco-informed Material Choice, Butterworth-Heinemann, 2009
5. M. Rappaz, M. Bellet, M. Deville, R. Snyder, Numerical Modelling in Materials Science and Engineering, Springer 2003.
6. D.M. Bourg, Excel w nauce i technice. Receptury, Helion 2006
7. Granta Design, White Papers

Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu

Nie podano dodatkowych publikacji

Informacje dodatkowe

Brak

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Przygotowanie do zajęć	58 godz
Udział w zajęciach seminaryjnych	30 godz
Udział w wykładach	30 godz
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	40 godz
Udział w ćwiczeniach laboratoryjnych	15 godz
Dodatkowe godziny kontaktowe z nauczycielem	5 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	180 godz
Punkty ECTS za moduł	6 ECTS