

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE  
AND TECHNOLOGY

Module name: Numerical methods in materials science

Academic year: 2019/2020 Code: CCHB-1-005-s ECTS credits: 3

Faculty of: Materials Science and Ceramics

Field of study: Chemistry of Building Materials Specialty: —

Study level: First-cycle studies Form and type of study: Full-time studies

Lecture language: English Profile of education: Academic (A) Semester: 0

Course homepage: —

Responsible teacher: dr hab. inż. Filipek Robert (rof@agh.edu.pl)

### Module summary

Ma poszerzoną wiedzę w zakresie metod obliczeniowych i narzędzi informatycznych niezbędnych do projektowania materiałów i modelowania procesów.

Potrafi pozyskiwać i przetwarzać informacje z podręczników, czasopism, baz danych oraz Internetu z zakresu metod numerycznych i krytycznie je oceniać.

Potrafi wykorzystać wiedzę matematyczną do opisu i modelowania procesów w technologiach ceramicznych.

### Description of learning outcomes for module

MLO code	Student after module completion has the knowledge/ knows how to/is able to	Connections with FLO	Method of learning outcomes verification (form of completion)
Social competence: is able to			
M_K001	Student is aware of the responsibility for his own work and the readiness to comply with the rules of group work and to take responsibility for the tasks he carries out together./ Ma świadomość odpowiedzialności za pracę własną oraz gotowość podporządkowania się zasadom pracy w grupie i ponoszenia odpowiedzialności za wspólnie realizowane zadania	CHB1A_K01	Activity during classes, Participation in a discussion, Involvement in teamwork
Skills: he can			

M_U001	The student is able to obtain and process information from textbooks, magazines, databases and the Internet in the field of numerical methods and to critically evaluate them. The student is able to use mathematical knowledge to describe and model processes in ceramic technologies./ Potrafi pozyskiwać i przetwarzać informacje z podręczników, czasopism, baz danych oraz Internetu z zakresu metod numerycznych i krytycznie je oceniać. Potrafi wykorzystać wiedzę matematyczną do opisu i modelowania procesów w technologiach ceramicznych.	CHB1A_U01	Activity during classes, Presentation, Execution of exercises
M_U002	Student understands the need for further education and improving their professional and personal competences./ Rozumie potrzebę dokończania się oraz podnoszenia swoich kompetencji zawodowych i personalnych	CHB1A_K01	Activity during classes, Oral answer, Presentation
Knowledge: he knows and understands			
M_W001	The student has extensive knowledge in the field of computational methods and IT tools necessary to design materials and model processes./ Ma poszerzoną wiedzę w zakresie metod obliczeniowych i narzędzi informatycznych niezbędnych do projektowania materiałów i modelowania procesów.	CHB1A_W08	Activity during classes, Test, Presentation

## Number of hours for each form of classes

Suma	Form of classes										
	Lectures	Auditorium classes	Laboratory classes	Project classes	Conversation seminar	Seminar classes	Practical classes	Fieldwork classes	Workshops	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
30	0	0	0	0	0	30	0	0	0	0	0

## FLO matrix in relation to forms of classes

MLO code	Student after module completion has the knowledge/ knows how to/is able to	Form of classes										
		Lectures	Auditorium classes	Laboratory classes	Project classes	Conversation seminar	Seminar classes	Practical classes	Fieldwork classes	Workshops	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
Social competence: is able to												

M_K001	Student is aware of the responsibility for his own work and the readiness to comply with the rules of group work and to take responsibility for the tasks he carries out together./ Ma świadomość odpowiedzialności za pracę własną oraz gotowość podporządkowania się zasadom pracy w grupie i ponoszenia odpowiedzialności za wspólnie realizowane zadania	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Skills: he can												
M_U001	The student is able to obtain and process information from textbooks, magazines, databases and the Internet in the field of numerical methods and to critically evaluate them. The student is able to use mathematical knowledge to describe and model processes in ceramic technologies./ Potrafi pozyskiwać i przetwarzać informacje z podręczników, czasopism, baz danych oraz Internetu z zakresu metod numerycznych i krytycznie je oceniać. Potrafi wykorzystać wiedzę matematyczną do opisu i modelowania procesów w technologiach ceramicznych.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_U002	Student understands the need for further education and improving their professional and personal competences./ Rozumie potrzebę dokończania się oraz podnoszenia swoich kompetencji zawodowych i personalnych	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Knowledge: he knows and understands												
M_W001	The student has extensive knowledge in the field of computational methods and IT tools necessary to design materials and model processes./ Ma poszerzoną wiedzę w zakresie metod obliczeniowych i narzędzi informatycznych niezbędnych do projektowania materiałów i modelowania procesów.	-	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-

## Student workload (ECTS credits balance)

Student activity form	Student workload
Udział w zajęciach dydaktycznych/praktyka	30 h
Preparation for classes	30 h
przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania	15 h
Realization of independently performed tasks	2 h
Summary student workload	77 h
Module ECTS credits	3 ECTS

## Additional information

### Module content

#### Seminar classes

Podstawy metody różnic skończonych na przykładzie jednowymiarowego zagadnienia transportu ciepła w przypadku stacjonarnym. Realizacja warunków początkowych i brzegowych w metodzie różnic skończonych. Uogólnienie idei metody różnic skończonych dla geometrii dwu- i trójwymiarowej.

Metoda elementów skończonych. Rozwiązanie słabe (uogólnione) a rozwiązanie w sensie klasycznym. Podstawy dyskretyzacji przestrzeni z użyciem metody elementów skończonych. Całkowa postać równań zachowania i ich dyskretyzacja na przykładzie jednowymiarowego zagadnienia transportu masy w przypadku niestacjonarnym. Metoda Galerkina. Rozwiązanie numeryczne.

Wybrane programy komputerowe do modelowania procesów w zakresie inżynierii materiałowej.

#### Teaching methods and techniques:

Seminar classes: Na zajęciach seminaryjnych podstawą jest prezentacja multimedialna oraz ustna prowadzona przez studentów. Kolejnym ważnym elementem kształcenia są odpowiedzi na powstałe pytania, a także dyskusja studentów nad prezentowanymi treściami.

#### Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu:

Warunkiem koniecznym zaliczenia jest uzyskanie oceny co najmniej 3.0 z seminarium

#### Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa:

Seminar classes:

- Attendance is mandatory: Yes
- Participation rules in classes: Studenci prezentują na forum grupy temat wskazany przez prowadzącego oraz uczestniczą w dyskusji nad tym tematem. Ocenie podlega zarówno wartość merytoryczna prezentacji, jak i tzw. kompetencje miękkie.

#### Method of calculating the final grade

średnia z kolokwium, prezentacji oraz aktywności na zajęciach

## **Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach:**

Wszystkie nieobecności na zajęciach seminaryjnych student winien odrobić. Sposób odrabiania zajęć ustala prowadzący indywidualnie ze studentem. Maksymalna liczba zajęć, które student może odrabiać wynosi 2.

## **Prerequisites and additional requirements**

Prerequisites and additional requirements not specified

## **Recommended literature and teaching resources**

1. T. Pang, „Metody obliczeniowe w fizyce”, PWN Warszawa 2001.
2. M. Rappaz, M. Bellet, M. Deville, „Numerical Modeling in Materials Science and Engineering”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2003.
3. A. Bjorck, G. Dahlquist, „Metody numeryczne”, PWN Warszawa 1987.
4. A.N. Tichonov, A. A. Samarski, „Równania fizyki matematycznej”, WNT Warszawa 1975.
5. L.C. Evans, „Równania różniczkowe cząstkowe”, PWN Warszawa 2002.
6. G.Engeln-Muellges, F. Uhlig, „Numerical Algorithms with C”, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg 1996.

## **Scientific publications of module course instructors related to the topic of the module**

- 1.R. Filipek, Modeling and inverse methods in materials engineering, Wydawnictwo Naukowe AKAPIT, Kraków, 2019.
- 2.J. Stec, J. Tarasiuk, S. Nagy, R. Smulski, J. Gluch, R. Filipek, “Non-destructive investigations of pore morphology of micropore carbon materials”, *Ceramics international*, 45, (2019), 3483-3491, doi: 10.1016/j.ceramint.2018.11.006.
- 3.R. Filipek, K. Szyszkiewicz, “Inverse methods in corrosion research and materials degradation”, *Ochrona przed Korozją*, 60 (10), (2017), 358-363.
- 4.A. Wierzbicka-Miernik, K. Miernik, R. Filipek, K. Szyszkiewicz, “Kinetics of intermetallic phase growth and determination of diffusion coefficients in solid-solid-state reaction between Cu and (Sn+1at.%Ni) pads”, *J Mater Sci*, 52, (2017), 10533-10544.
- 5.K. Szyszkiewicz, J. J. Jasielec, M. Danielewski, A. Lewenstam, R. Filipek, “Modeling of Electrodifusion Processes from Nano to Macro Scale”, *Journal of The Electrochemical Society*, 164 (11), (2017), E3559-E3568.
- 6.J.J. Jasielec, R. Filipek, K. Szyszkiewicz, J. Fausek, M. Danielewski, A. Lewenstam, „Computer simulations of electrodiffusion problems based on Nernst-Planck and Poisson equations”, *Computational Materials Science*, 63, (2012),75-90.

## **Additional information**

None