



POLITECHNIKA RZESZOWSKA im. I. Łukasiewicza

Wydział	Wydział Chemiczny
Studia	III stopnia (doktoranckie)
Dyscyplina	Inżynieria chemiczna

KARTA MODUŁU

Nazwa modułu		Współczesne metody komputerowe mechaniki płynów (Modern methods of computational fluid mechanics)			
Kod modułu		Grupa przedmiotów	podstawowy		
Koordynator modułu		Prof. dr hab. Anna Kucaba-Piętal			
Osoby prowadzące zajęcia		Prof. dr hab. Anna Kucaba-Piętal,			
Wymiar i forma zajęć		20 godzin, wykład			
Rok studiów	1-2	Semestr	I-IV	Obowiązuje od roku akademickiego	2020/2021

Opis efektów kształcenia dla modułu

Nr efektu kształcenia	Doktorant, który zaliczył moduł wie/umie/potrafi	Symbol efektu	Sposób weryfikacji efektów kształcenia
1	Posiada podstawowa wiedzę na temat wpływu skali na sposób opisu zjawisk zachodzących w materii, potrafi określić zakres stosowalności	IC_W_01 MEW1	Test koncowy
2	Ma dobrze podbudowana teoretycznie wiedzę na temat współczesnych metod obliczeniowych mechaniki płynów, w zależności od skali zjawiska	IC_W_02 MEW2	Test koncowy
3	Ma umiejętność doboru właściwej metody w zależności od skali zjawiska, potrafi efektywnie pozyskiwać informacje na ten temat dokonywać właściwej selekcji i interpretacji.	IC_U_01 MEW3	Test koncowy

Treści modułu (program zajęć)

- (4h) Wpływ skali na opis materii. Zasady zachowania: masy, pędu i energii. Założenia dotyczące modelowania materii jako klasycznego ośrodka ciągłego (Cauchego) oraz uogólnionego (np. Coserat, Rivlina). Ośrodki mikropolarne. Opis materii na poziomie

atomowym; siły działające na poziomie atomowym. Model komputerowy materii: siły działające na poziomie atomowym i sposoby ich opisu, potencjały oddziaływania. Sposoby opisu materii w mezoskali. Wpływ opisu ośrodka na modelowanie numeryczne. Zakresy stosowalności opisu w zależności od skali czasowej zjawiska oraz wymiaru przestrzennego.

- (6h)Przegląd metod obliczeniowych mechaniki płynów („skala „makro”) na gruncie ośrodka ciągłego: (a) metoda elementów skończonych - ADINA F, (b) metoda objętości skończonych Solver Ansys Fluent). Opis materii jako ośrodka ciągłego: (continuum Cachyego), równania wyrażające zasady zachowania masy, pędu i energii. Równania konstytutywne, stale materiałowe. Zagadnienie modelowania turbulencji przepływu, podstawowe modele turbulencji. Problematyka metod komputerowych. Preprocesing i postprocesing, tworzenie siatek. Wpływ siatki na dokładność. Szczegółowe omówienie metody elementów skończonych w kontekście programu ADINA F wykorzystywanego do ćwiczeń laboratoryjnych.
- (5h)Metody komputerowe mikro i nanomechaniki płynów. Wpływ skali na dobór metody; zakresy ich stosowalności. Podstawy metod wykorzystujących opis materii na poziomie atomowym różnice między nimi: deterministyczna metoda dynamiki molekularnej oraz statystyczna metoda Monte Carlo. Problematyka symulacji ruchu płynu składającego się z cząstek wieloatomowych np. polimery, DNA, kwas hialuronowy. Metody mikroskalowe: Lattice Boltzman method, Dissipative element methods. Przykłady zastosowań.
- (5h)Metoda Dynamiki Molekularnej – podstawy teoretyczne. Symulacja ewolucji układu w czasie w różnych zespołach kanonicznych. Równania ruchu molekuly. Obliczanie energii. Promień odcięcia oddziaływań. Tablica Verleta - periodyczne warunki brzegowe. Metody równoważenia układu. Funkcja RDF. Obliczanie wielkości termodynamicznych oraz makroskopowych z danych symulacji komputerowych. Wzory Greena-Kubo, metoda histogramu. Walidacja metody Dynamiki Molekularnej.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Wymagania formalne: **Rejestracja na określony semestr studiów.**

Wymagania wstępne w kategorii Wiedzy: **Wiedza z matematyki, fizyki, chemii, na poziomie studiów wyższych.**

Wymagania wstępne w kategorii Umiejętności: **Umiejętność pozyskiwania i wykorzystywania informacji z literatury i jej analiza**

Wymagania wstępne w kategorii Kompetencji społecznych: **Student ma świadomość uczenia się i dalszego doskonalenia zawodowego, jeżeli chce zająć odpowiednią pozycję finansową i zawodową w firmie**

Zalecana literatura i pomoce naukowe

Anna Kucaba-Pietal: Podstawy modelowania przepływów w nanokanalach metoda dynamiki molekularnej, Oficyna wydawnicza PRZ, Rzeszów 2017

Monografia pod redakcją A. Muc, M. Chwał P. Garstecki i G. Szefer: Nanomechanics. Selected problems, Oficyna Wydawnicza PK Kraków 2014

Zbyszko Kazimierski: Podstawy Mechaniki Płynów i Metod Komputerowej Symulacji Przepływów, Wydawnictwo Politechniki Łódzkiej, Łódź 2004

Nakład pracy doktoranta (bilans punktów ECTS)	
Forma nakładu pracy doktoranta (udział w zajęciach, przygotowanie do zajęć, przygotowanie prezentacji, przygotowanie do zaliczenia, przygotowanie do egzaminu, egzamin itp.)	Obciążenie doktoranta [h]
Udział w zajęciach	20
Przygotowanie do zajęć	10
Przygotowanie do egzaminu	20
Egzamin	5
Studiowanie zalecanej literatury:15 godz./semestr	15
Sumaryczne obciążenie pracą doktoranta	70
Punkty ECTS za moduł	2
<p>Warunki zaliczenia modułu i ocena końcowa (OK):</p> <p>Warunkiem zaliczenia modułu jest napisanie testu z przedmiotu obejmującego zagadnienia poruszane na wykładzie i uzyskanie oceny pozytywnej. Test otwarty, 20 pytań , max ilość punktów możliwa do uzyskania 60 (3 punkty na każde pytanie).</p> <p>Oceny: 55-60: bardzo dobry, 50-55: + dobry, 45-50: + dost, 40-45: dost.</p> <p>Ocena końcowa (OK) jest równa ocenie z egzaminu.</p>	
<p>Uwagi:</p>	

Koordynator modułu*

Kierownik katedry/zakładu*

Kierownik studiów
doktoranckich*

Data, podpis

Data, podpis

Data, podpis

*karty modułu w wersji elektronicznej nie zawierają podpisu