

Δομή Περιγραμμάτων Μαθημάτων ΔΜΠΣ Μαθηματικής Προτυποποίησης

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	Μεταπτυχιακό		
ΔΠΜΣ	ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΚΑΙ ΤΗ ΧΡΗΜΑΤΟΟΙΚΟΝΟΜΙΚΗ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	9514	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	2
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Μοριακή Προσομοίωση Υλικών		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
Διαλέξεις – Ασκήσεις	3	6	
Εργαστήριο	0		
Εργασίες	3		
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (4).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	ΕΙΔΙΚΟΥ ΥΠΟΒΑΘΡΟΥ (μάθημα Κατεύθυνσης)		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Φυσική (Μηχανική), Διαφορικός και Ολοκληρωτικός Λογισμός, Θεωρία Πιθανοτήτων, Προγραμματισμός Η/Υ σε βασικό προπτυχιακό επίπεδο		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΗ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ [στην Αγγλική, ως υλικό μελέτης (reading course)]		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	https://helios.ntua.gr/course/view.php?id=3016		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

Γνώσεις:

Η προτυποποίηση και η υπολογιστική προσομοίωση σε μοριακό, μεσοσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο αποτελούν σήμερα σημαντικά εργαλεία για την κατανόηση των σχέσεων δομής – ιδιοτήτων –επεξεργασίας – επιδόσεων υλικών και το σχεδιασμό προϊόντων που ικανοποιούν συγκεκριμένες απαιτήσεις εφαρμογής. Ξεκινώντας απ' αυτή τη διαπίστωση, στόχοι του μαθήματος είναι:

- Η εξοικείωση των σπουδαστών με τις αρχές της στατιστικής μηχανικής συστημάτων εντός και εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας.
- Η χάραξη κατευθυντήριων γραμμών για την ανάπτυξη μικροσκοπικών και μεσοσκοπικών προτύπων υλικών για τη θεωρητική ανάλυση και προσομοίωσή τους.
- Η κατανόηση των βασικών αρχών και εφαρμογών στοχαστικών (κυρίως Monte Carlo) και ντετερμινιστικών (κυρίως Μοριακή Δυναμική) μεθόδων υπολογιστικής προσομοίωσης για την πρόρρηση ιδιοτήτων υλικών.
- Η εξάσκηση σε υπολογιστικές μεθόδους χαρακτηρισμού της δομής και της μοριακής κινητικότητας υλικών και σύνδεση των αποτελεσμάτων με πειραματικές μετρήσεις.

Δεξιότητες:

Με την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής/τρια θα είναι σε θέση να:

- Χρησιμοποιεί τις αρχές της στατιστικής μηχανικής προκειμένου να εκφράζει θερμοδυναμικές (π.χ. ογκομετρική συμπεριφορά, ενθαλπία, χημικό δυναμικό), δυναμικές (π.χ. συντελεστές διάχυσης, ιξώδες, θερμική αγωγιμότητα) και μηχανικές (π.χ. τάση, ελαστικές σταθερές) ενός υλικού συστήματος ως μέσες τιμές στατιστικού συνόλου ισορροπίας.
- Κατανοεί πώς η δομή και η δυναμική σε ένα υλικό σύστημα μπορούν να περιγραφούν ποσοτικά μέσω συναρτήσεων συσχέτισης στο χώρο και στο χρόνο και πώς οι περιγραφές αυτές μπορούν να επαληθευθούν με πειράματα σκέδασης ή φασματοσκοπίας.
- Επιλέγει πεδία δυνάμεων κατάλληλα για την περιγραφή υλικών συστημάτων σε ατομικό επίπεδο.
- Χρησιμοποιεί υπολογιστικούς κώδικες Monte Carlo ή molecular dynamics για τη διεξαγωγή μοριακών προσομοιώσεων υλικών.
- Αναλύει τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για την εξαγωγή ιδιοτήτων και την αποκάλυψη των μοριακών μηχανισμών που τις καθορίζουν.
- Κατανοεί τις αρχές της συστηματικής αδροποίησης της μοριακής αναπαράστασης και των μεσοσκοπικών μεθόδων προσομοίωσης (Langevin Dynamics, Brownian Dynamics, Dissipative Brownian Dynamics) για παρακολούθηση της εξέλιξης υλικών συστημάτων σε μεγάλες κλίμακες μήκους και χρόνου και την πρόβλεψη των ιδιοτήτων τους.
- Κατανοεί τις αρχές της θεωρίας σπανίων συμβάντων και τις εφαρμογές της στην πρόβλεψη φαινομένων διάχυσης, δομικής χαλάρωσης, πυρήνωσης και ανάπτυξης κλπ.

- Καταstrώννει στρατηγικές για την προσομοίωση υλικών σε πολλαπλές κλίμακες μήκους και χρόνου ως μέσο μοριακού σχεδιασμού υλικών.

Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα;

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας

και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

.....

Άλλες...

.....

Ικανότητες:

Με την επιτυχή παρακολούθηση του μαθήματος καλλιεργείται η ικανότητα για :

- Αυτόνομη εργασία (δευτερευόντως ομαδική εργασία, μέσω της ανάθεσης ομαδικών εργασιών)
- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με χρήση υπολογιστικών τεχνολογιών
- Διατύπωση φυσικού/επιστημονικού/τεχνολογικού προβλήματος σε μαθηματική γλώσσα
- Κατάstrωση ροών εργασίας που αξιοποιούν υπολογιστικές μεθοδολογίες σε διάφορα επίπεδα (ατομιστικό, μεσοσκοπικό, μακροσκοπικό), ανάλογα με τις κλίμακες μήκους και χρόνου που υπεισέρχονται σε ένα πρόβλημα

Συνδυασμός γνώσεων και δεξιοτήτων: (α) για την ανάλυση ενός σύνθετου προβλήματος, ή (β) για την επιλογή των κατάλληλων μέσων, μεθόδων, προσεγγίσεων, με σκοπό το σχεδιασμό υλικών για συγκεκριμένες χρήσεις.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

I. Αρχές Στατιστικής Μηχανικής

Δυναμικές τροχιές στο χώρο φάσεων. Πυκνότητα πιθανότητας στατιστικού συνόλου.

Εξίσωση Liouville. Αναντιστρεπτότητα και επίτευξη θερμοδυναμικής ισορροπίας.

Στατιστικά σύνολα ισορροπίας: μικροκανονικό, κανονικό, ισόθερμο-ισοβαρές.

Υπολογισμός θερμοδυναμικών ιδιοτήτων. Η πίεση (τάση) ως μέση τιμή στατιστικού

συνόλου: θεώρημα virial. Το χημικό δυναμικό ως μέση τιμή στατιστικού συνόλου:

θεώρημα Widom.

Μέγα κανονικό στατιστικό σύνολο για ανοικτά συστήματα: διακυμάνσεις πυκνότητας, υπολογισμός ισοθέμων ρόφησης.

Συναρτήσεις κατανομής για το χαρακτηρισμό της δομής, σχέσεις τους με θερμοδυναμικές ιδιότητες και με μετρήσεις περίθλασης ακτίνων X ή νετρονίων.

II. Μοριακές Προσομοιώσεις

Μοριακά ομοιώτυπα (μοντέλα), συναρτήσεις δυναμικού, περιοδικές οριακές συνθήκες.

Υπολογισμός της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας.

Ολοκλήρωση Monte Carlo, δειγματοληψία Monte Carlo. Σύνδεση με θεωρία στοχαστικών ανεξίξεων. Αλγόριθμος Metropolis στα κανονικό, ισόθερμο-ισοβαρές και μέγα κανονικό στατιστικά σύνολα. Μεροληψία στο εγχείρημα στοιχειωδών κινήσεων και αντίστοιχοι κανόνες αποδοχής.

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής (MD). Αλγόριθμοι για την ολοκλήρωση των

δυναμικών εξισώσεων. Μοριακή δυναμική παρουσία ολονομικών περιορισμών

υπαγορευομένων από τη μοριακή γεωμετρία. Μέθοδοι μοριακής δυναμικής σε στατιστικά σύνολα διάφορα του μικροκανονικού.

Ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων για τον υπολογισμό δομικών,

θερμοδυναμικών και δυναμικών ιδιοτήτων. Συναρτήσεις χρονικής αυτοσυσχέτισης και σχέση τους με φασματοσκοπικές μετρήσεις. Στοιχεία θεωρίας γραμμικής απόκρισης. Υπολογισμός συντελεστών μεταφοράς (διαχυτότητας, θερμικής αγωγιμότητας, ιξώδους).

III. Τεχνικές για μεγάλες κλίμακες μηκών και χρόνων

Αδροποίηση (coarse-graining) και αναγωγή σε μοντέλα με λιγότερους βαθμούς ελευθερίας για τη μελέτη φαινομένων σε μεγάλες κλίμακες μήκους και χρόνου. Προβολή των εξισώσεων κίνησης πάνω σε λίγους, αργά μεταβαλλόμενους βαθμούς ελευθερίας. Στοιχεία θεωρίας κίνησης Brown. Αρχές των μεθόδων Brownian Dynamics, Dissipative Particle Dynamics.

Θεωρία μεταβατικών καταστάσεων για την εκτίμηση του ρυθμού σπάνιων συμβάντων. Εξίσωση Kramers για τη σταθερά ρυθμού μετάβασης. Θεωρία Bennett-Chandler για τον προσδιορισμό σταθεράς ρυθμού από προσομοιώσεις. Προσδιορισμός τροχιών μετάβασης και σταθερών ρυθμού σε συστήματα με πολλούς, συνεζυγμένους αργούς βαθμούς ελευθερίας. Στοχαστικές ανελίξεις Poisson που προκύπτουν από αλληλουχία σπάνιων συμβάντων. Εξίσωση Master. Κινητική προσομοίωση Monte Carlo.

IV. Εφαρμογές

Συζήτηση παραδειγμάτων υπολογισμών μοριακής προσομοίωσης για κατανόηση και πρόρρηση δομής, θερμοδυναμικών και ρεολογικών ιδιοτήτων πολυμερικών τμημάτων μεγάλου μοριακού βάρους, διαπερατότητας πολυμερικών μεμβρανών, δομής και λειτουργίας λιπιδικών μεμβρανών και βιολογικών μακρομορίων, φαινομένων αυτο-οργάνωσης συμπολυμερών και πολυμερών σε διεπιφάνειες, ρόφησης και διάχυσης σε ζεολίθους, δομικής χαλάρωσης και μηχανικών ιδιοτήτων στην υαλώδη κατάσταση, λεπτών υμενίων, νανοσωματιδίων και νανοσυνθέτων υλικών.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</p>	Πρόσωπο με πρόσωπο																							
<p>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</p>	Σημειώσεις, Εργασίες για το σπίτι (ανάθεση εργασιών από διδάσκοντα και υποβολή εργασιών από τους σπουδαστές)																							
<p>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας. Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ. Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="702 1469 1031 1536">Δραστηριότητα</th> <th data-bbox="1031 1469 1372 1536">Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="702 1536 1031 1570">Διαλέξεις</td> <td data-bbox="1031 1536 1372 1570">13x3=39 ώρες</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1570 1031 1603">Μελέτη</td> <td data-bbox="1031 1570 1372 1603">13x4=52 ώρες</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1603 1031 1671">Εργασίες/Άσκήσεις κατ' οίκον</td> <td data-bbox="1031 1603 1372 1671">2x20=40 ώρες</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1671 1031 1704">Εργαστήριο</td> <td data-bbox="1031 1671 1372 1704">0</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1704 1031 1738">Υπολογιστικό Πρόβλημα</td> <td data-bbox="1031 1704 1372 1738">1x30=30 ώρες</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1738 1031 1805">Εκπαιδευτικές επισκέψεις</td> <td data-bbox="1031 1738 1372 1805">0</td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1805 1031 1839"></td> <td data-bbox="1031 1805 1372 1839"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1839 1031 1872"></td> <td data-bbox="1031 1839 1372 1872"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1872 1031 1906"></td> <td data-bbox="1031 1872 1372 1906"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="702 1906 1031 1975">Σύνολο Μαθήματος</td> <td data-bbox="1031 1906 1372 1975">161</td> </tr> </tbody> </table>	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου	Διαλέξεις	13x3=39 ώρες	Μελέτη	13x4=52 ώρες	Εργασίες/Άσκήσεις κατ' οίκον	2x20=40 ώρες	Εργαστήριο	0	Υπολογιστικό Πρόβλημα	1x30=30 ώρες	Εκπαιδευτικές επισκέψεις	0							Σύνολο Μαθήματος	161	
Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου																							
Διαλέξεις	13x3=39 ώρες																							
Μελέτη	13x4=52 ώρες																							
Εργασίες/Άσκήσεις κατ' οίκον	2x20=40 ώρες																							
Εργαστήριο	0																							
Υπολογιστικό Πρόβλημα	1x30=30 ώρες																							
Εκπαιδευτικές επισκέψεις	0																							
Σύνολο Μαθήματος	161																							
<p>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</p>	Γλώσσα Αξιολόγησης: Ελληνικά (για φοιτητές Erasmus: Αγγλικά)																							

<p>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμών, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</p> <p>Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</p>	<p>Δύο σειρές υπολογιστικών ασκήσεων: 2 x 30% = 60%</p> <p>Υπολογιστικό πρόβλημα (Monte Carlo ή molecular dynamics, αναλαμβάνόμενο από διμελείς ομάδες): 40%</p> <p>Υπάρχει ρητή αναφορά των παραπάνω κριτηρίων αξιολόγησης στην εισαγωγή του μαθήματος και στις εκφωνήσεις, αναρτώμενες στο σύστημα helios</p>
---	---

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

<p>Σημειώσεις διδάσκοντος (αναρτώνται στο helios): Δ.Ν. Θεοδώρου, “<i>Applied Molecular Theory for Engineers</i>” (στην αγγλική γλώσσα)</p> <p>Αντίγραφα διαφανειών χρησιμοποιούμενων από το διδάσκοντα στις διαλέξεις (στην ελληνική γλώσσα)</p> <p>Συνιστώμενα βιβλία από τη διεθνή βιβλιογραφία:</p> <p>D. Frenkel and B. Smit, <i>Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications</i>, Academic Press: New York, 2002.</p> <p>M.P. Allen and D.J. Tildesley, <i>Computer Simulations of Liquids</i>, Clarendon Press: Oxford, 1989.</p> <p>A.R. Leach, <i>Molecular Modelling: Principles and Applications</i>, Pearson-Prentice Hall: London, 2001.</p> <p>P. Nielaba, M. Mareschal, G. Ciccotti, <i>Bridging Time Scales: Molecular Simulations for the Next Decade</i>, Springer: Berlin, 2002.</p> <p>D. Chandler, <i>Introduction to Modern Statistical Mechanics</i>, Oxford University Press: Oxford, 1987.</p> <p>Συναφή Επιστημονικά Περιοδικά:</p> <p>Molecular Systems Design and Engineering Journal of Chemical Physics Journal of Physical Chemistry Molecular Simulation Journal of Computer-Aided Materials Design</p>
--