

MAS_474 Ειδικά Θέματα Υπολογιστικής Επιστήμης των Υλικών

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	MAS_474	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	7 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Ειδικά Θέματα Υπολογιστικής Επιστήμης των Υλικών		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
	3	5	
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Υποβάθρου		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	Πληροφορική I, Πληροφορική II, Πληροφορική IV, Εφαρμοσμένα μαθηματικά IV		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνικά		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Όχι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.matersci.upatras.gr/el/courses/		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα
<p>Στο τέλος αυτού του μαθήματος ο φοιτητής πρέπει να είναι σε θέση:</p> <p>Να σχεδιάζει και να επιλύει προβλήματα εντοπίζοντας και εφαρμόζοντας κατάλληλες μεθόδους υπολογιστικής επιστήμης των υλικών. Να κατανοεί πλήρως τις δυνατότητες και τους περιορισμούς των υπολογιστικών πειραμάτων και προσομοιώσεων. Να αποκτήσει εμπειρία στη χρήση ελεύθερου λογισμικού κβαντικής χημείας, πεπερασμένων διαφορών και μοριακών προσομοιώσεων. Να συνδέει αποτελέσματα και φαινόμενα που συμβαίνουν σε διαφορετικές χωρικές και χρονικές κλίμακες. Για επιλεγμένα προβλήματα, να δημιουργεί υπολογιστικό κώδικα, να επεξεργάζεται τα αποτελέσματα και να ελέγχει την αξιοπιστία τους. Να μπορεί να αναλύσει και να οπτικοποιήσει τα αποτελέσματα των υπολογιστικών πειραμάτων και να συγγράφει τις εργασίες υπό τη μορφή ολοκληρωμένων επιστημονικών αναφορών.</p> <p><i>Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Διά Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών.</i></p>
Γενικές Ικανότητες
<p>Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών</p> <p>Αυτόνομη εργασία</p> <p>Ομαδική εργασία</p> <p>Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών</p> <p>Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης</p>

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Μέθοδοι επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων, προβλημάτων συνοριακών τιμών και προβλημάτων ιδιοτιμών. Εφαρμογές στην εξίσωση του Schrödinger και στις εξισώσεις διάχυσης. Μέθοδοι από πρώτες αρχές (ab initio). Λογισμός μεταβολών και συναρτησιακά. Ολοκληρωτικές εξισώσεις. Είδη ολοκληρωτικών εξισώσεων με εφαρμογές στην επιστήμη των υλικών και μέθοδοι αριθμητικής επίλυσης.

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο
------------------	--------------------

ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Η διδασκαλία του μαθήματος γίνεται στο υπολογιστικό κέντρο. Κάθε φοιτητής έχει πρόσβαση σε προσωπικό υπολογιστή και σε χρήση λογισμικού, κατά κανόνα ανοιχτού κώδικα.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου
	Διαλέξεις	26
	Εργαστηριακές Ασκήσεις	13
	Συγγραφή Εργασιών	41
	Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας	70
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Σύνολο Μαθήματος	150
	Εργασίες και παρουσιάσεις κατά τη διάρκεια του εξαμήνου. Ο τελικός βαθμός προκύπτει από τις εργαστηριακές εκθέσεις, και από εξέταση κατά τη δημόσια παρουσίαση των εργαστηριακών ασκήσεων που αφορούν υπολογιστική μοντελοποίηση και επίλυση προβλημάτων.	

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Computational Materials Science, Dierk Raabe; Wiley 1998
- Computational Chemistry: A Practical Guide For Applying Techniques To Real-World Problems. David C. Young; Copyright 2001 John Wiley & Sons
- R. LeSar, Introduction to Computational Materials Science: Fundamentals to Applications, CUP, 2013