Modulbezeichnung: **Werkstoffsimulation (M2/M3) (COMM)** **12.5 ECTS**
(Computational Modelling of Materials)

Modulverantwortliche/r: Stefan Sandfeld
Lehrende: Michael Zaiser, Stefan Sandfeld

Startsemester: WS 2016/2017	Dauer: 2 Semester	Turnus: jährlich (WS)
Präsenzzeit: 135 Std.	Eigenstudium: 240 Std.	Sprache: Englisch

Lehrveranstaltungen:

Pflichtfächer / mandatory courses

Introduction to Advanced Maths and Calculus (WS 2016/2017, Seminar, 1 SWS, Paolo Moretti)
Multi-scale Simulation Methods I (Lecture) (WS 2016/2017, Vorlesung, 1 SWS, Stefan Sandfeld et al.)
Multi-scale Simulation Methods I (Tutorial) (WS 2016/2017, Übung, 1 SWS, Stefan Sandfeld et al.)
Multi-scale Simulation Methods II (Lecture) (SS 2017, Vorlesung, 1 SWS, Paolo Moretti)
Multi-scale Simulation Methods II (Tutorial) (SS 2017, Tutorium, 1 SWS, Paolo Moretti et al.)
Nebenfachpraktikum Werkstoffsimulation (SS 2017, Praktikum, 1 SWS, Paolo Moretti et al.)

Wahlvorlesungen / elective courses

Numerische Methoden in den Werkstoffwissenschaften - Atomistische Methoden (SS 2017, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Erik Bitzek)
Generalized Continuum Models of Materials Mechanics (SS 2017, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)
Foundations of Finite Element Simulation (Tutorial) (WS 2016/2017, Übung, 1 SWS, Stefan Sandfeld et al.)
Foundations of Finite Element Simulation (Lecture) (WS 2016/2017, Vorlesung, 1 SWS, Stefan Sandfeld)
Modelling Materials with Finite Element Simulations (Tutorial) (SS 2017, Übung, 1 SWS, Stefan Liebenstein)
Modelling Materials with Finite Element Simulations (Lecture) (SS 2017, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)
Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Lecture) (WS 2016/2017, optional, Vorlesung, 1 SWS, Michael Zaiser)
Dislocation Theory and Dislocation Simulation (Tutorial) (WS 2016/2017, optional, Übung, 1 SWS, Michael Zaiser)
Computational models of biomaterial failure (SS 2017, optional, Vorlesung mit Übung, 2 SWS, Paolo Moretti)
Seminar Computational Materials Science I (WS 2016/2017, optional, Seminar, 2 SWS, Michael Zaiser et al.)
Seminar Computational Materials Science II (SS 2017, optional, Seminar, 2 SWS, Michael Zaiser et al.)

Inhalt:

In this modul the foundations and the application of computer-based modeling and simulation methods that are commonly used in computational materials science are learned. Those simulations are an important counterpart to experiments and purely theoretical considerations and have become extremely powerful during the last decades. Knowledge about common simulation methods on different scales together with understanding how the physics transfers into a model and how simulations can be used to answer materials questions will turn out to be very helpful with respect to any major.

Lernziele und Kompetenzen:

Fachkompetenz

Wissen

Lernende können materialwissenschaftliche Anwenungsgebiete von relevanten Simulationsmethoden wiedergeben. Sie sind in der Lage theoretische Grundlagen wiederzugeben (z.B. Kontinuumsmechanik, Vektoren und Tensoren, Finite Elemente, Programmierung mit Python).

Verstehen

Lernende können die Rolle von Simulationsverfahren in der Werkstoffwissenschaft aufzeigen. Sie können werkstoffwissenschaftlichen Phänomenen klassifizieren, deren relevante Zeit- und Längenskalen abstrahieren und Mechanismen in Hinblick auf Simulationen abstrahieren und klassifizieren. Sie können die Funktionsweisen von Simulationsmethoden erläutern. Dazu zählen u.a.:

- Diskrete Versetzungsdynamik
- Atomistische Simulationen
- Finite Element Simulation von Elastizität und Plastizität
- Phasenfeldmethode
- Mehrskalensimulationsmethoden

Anwenden

Lernende können allgemeine werkstoffwissenschaftliche Simulationsprobleme durch Anwendung von gelerntem Wissen und das Zusammenführen von unterschiedlichen gelernten Techniken und Methoden lösen.

Analysieren

Lernende können gezielt eigene Herleitungen von Simulationsmodellen unter vereinfachten Annahmen durchführen.

Evaluieren (Beurteilen)

Lernende können eigene spezielle Modellvarianten aufstellen, oder sich Testfälle ausdenken um gezielt Hypothesen zu testen oder Annahmen zu validieren. Lernende sind in der Lage, zu bewerten, wann ein Simulationsfehler klein, groß, relevant, vernachlässigbar ist.

Erschaffen

Lernende können neue werkstoffwissenschaftliche Simulationsprobleme durch

- das Zusammenführen von unterschiedlichen gelernten Techniken und Methoden sowie
- dem kreativen Planen

eigenständig und in Kooperation mit anderen Lernenden lösen.

Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

[1] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Allgemeine Werkstoffeigenschaften | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[2] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Allgemeine Werkstoffeigenschaften | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[3] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffkunde und Technologie der Metalle | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[4] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffkunde und Technologie der Metalle | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[5] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Glas und Keramik | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[6] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Glas und Keramik | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[7] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3

(gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Korrosion und Oberflächentechnik | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[8] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Korrosion und Oberflächentechnik | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[9] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Polymerwerkstoffe | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[10] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Polymerwerkstoffe | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[11] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffe in der Elektrotechnik | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[12] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffe in der Elektrotechnik | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[13] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffe in der Medizin | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[14] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Werkstoffe in der Medizin | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

[15] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Mikro- und Nanostrukturfoschung | 2. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M2) | Werkstoffsimulation)

[16] **Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science)**
(Po-Vers. 2010 | TechFak | Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (Master of Science) | Module M1 - M3 (gegliedert nach Kernfächern) | Kernfach Mikro- und Nanostrukturfoschung | 3. Werkstoffwissenschaftliches Modul (M3) | Werkstoffsimulation)

Studien-/Prüfungsleistungen:

Werkstoffsimulation_ (Prüfungsnummer: 64401)
Prüfungsleistung, mündliche Prüfung, Dauer (in Minuten): 20
Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

Erstablegung: SS 2017, 1. Wdh.: WS 2017/2018
1. Prüfer: Stefan Sandfeld