

2 up. 
Prof. dr hab. inż. Stanisław Cudziło

Nazwa przedmiotu: Metody obliczeniowe w chemii
Nazwa w jęz. angielskim: Numerical methods in chemistry
Kod przedmiotu: WTCCXCSI-MO

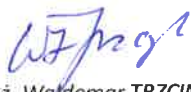
Dane dotyczące przedmiotu:
Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Obowiązuje od naboru październik 2016

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:		
Zaliczenie na ocenę		
Język wykładowy:		
polski		
Skrócony opis:		
Poznanie zasad algorytmizacji obliczeń oraz podstaw wysokopoziomowego języka programowania Pascal. Poznanie wybranych metod numerycznych. Rozwiązywanie zadań i problemów z zakresu chemii za pomocą własnych programów komputerowych.		
Opis:		
1. Algorytmizacja obliczeń. Definicja algorytmu, zapis algorytmu w postaci schematu blokowego. W/2 C/1 2. Analiza błędów w modelowaniu i symulacji. W/1 3. Podstawowe elementy języka Pascal. Struktura programu, alfabet języka, nazwy, liczby, znaki i łańcuchy znaków, etykiety, komentarze. W/1 C/1 4. Typy danych i zmiennych, deklaracje typu, wyrażenia arytmetyczne. W/2 C/1 5. Instrukcje wprowadzania i wyprowadzania, instrukcja podstawiania, instrukcje warunkowe, instrukcje iteracyjne, instrukcja skoku. W/2 C/2 6. Funkcje i procedury, tablice. W/2 C/2 7. Interpolacja wielomianami. Interpolacja zależności stałej równowagi chemicznej od temperatury. W/1 C/2 8. Aproksymacja danych doświadczalnych (aproksymacja średniokwadratowa). Aproksymacja zależności stałej szybkości reakcji i ciepła właściwego od temperatury. W/2 C/2 9. Przybliżone rozwiązywanie równań nieliniowych i ich układów (metody połowienia, siecznych i stycznych). W/2 C/2 10. Kolokwium zaliczeniowe W/1		
Literatura:		
Podstawowa: 1. Cz. Rymarz, Metody numeryczne z algorytmami, skrypt WAT, 1981. 2. Z. Pakowski, M. Głębowski, Symulacja procesów inżynierii chemicznej, Politechnika Łódzka, 2001 3. L. Buczkowski, Programowanie w Turbo Pascalu 7.0: podręcznik dla początkujących, Akademicka Oficyna Wydawnicza PLJ, 1993. 4. B. Baron, Metody numeryczne w Turbo Pascalu, Wyd. Helion, 1995. Uzupełniająca: 1. D. Boncler, Turbo Pascal for Windows, Komputerowa Oficyna "Help", 1993. 2. H. Budzisz, E. Filipow-Pierarska, Algorytmy, programowanie w języku Pascal, Wydawnictwo Uczelniane Politechniki Koszalińskiej, 1998. 3. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, Metody numeryczne, Politechnika Warszawska, 1993.		
Efekty kształcenia:		
Numer	Opis	Odniesienie do efektów kierunkowych
W1	Opanował wiedzę z matematyki i informatyki pozwalającą na posługiwanie się metodami matematycznymi w chemii	K_W07
W2	Opanował wiedzę umożliwiającą wykorzystanie komercyjnych pakietów oprogramowania do prostych obliczeń chemicznych	K_W09
W3	Zna modele i zasady modelowania procesów chemicznych	K_W11
U1	Potrafi opisać matematycznie problem z zakresu chemii, dobrać odpowiednie metody numeryczne i zbudować algorytm rozwiązania problemu	K_U08
U2	Potrafi krytycznie ocenić istniejące rozwiązania z zakresu chemii wykorzystując modelowanie numeryczne	K_U13

K1	Ma świadomość poziomu swej wiedzy i umiejętności oraz potrafi określić kierunki dalszego uczenia się i efektywnie realizować proces samokształcenia	K_K01				
K2	Umie zaplanować realizację zadań oraz właściwie określić priorytety służące ich realizacji	K_K03				
Metody i kryteria oceniania:						
Przedmiot zaliczany jest na podstawie wyników z kolokwium. Student odpowiada na 5 pytań. Zdanie egzaminu wymaga uzyskania minimum 51% punktów możliwych do uzyskania za pełne odpowiedzi. Ćwiczenia z wykorzystaniem komputerów zaliczane są na podstawie obecności oraz sprawozdań z wykonanych zadań. Efekty W1, W2, W3 i K1 weryfikowane są podczas kolokwium końcowego. ocena 2 – poniżej 50% punktów możliwych do uzyskania; ocena 3 – 51 ÷ 60% punktów możliwych do uzyskania; ocena 3,5 – 61 ÷ 70% punktów możliwych do uzyskania; ocena 4 – 71 ÷ 80% punktów możliwych do uzyskania; ocena 4,5 – 81 ÷ 90% punktów możliwych do uzyskania; ocena 5 – powyżej 91% punktów możliwych do uzyskania. Efekty W1, U1, U2, i K2 oceniane są w trakcie realizacji ćwiczeń i na podstawie sprawozdań z ćwiczeń.						
Praktyki zawodowe:						
brak						
Forma studiów						
stacjonarne						
Rodzaj studiów						
I stopnia						
Rodzaj przedmiotu						
obowiązkowy						
Przedmioty wprowadzające						
- Chemia ogólna i nieorganiczna Wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć, wielkości i zależności termodynamiki i termodynamiki chemicznej. - Matematyka Wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć i operacji matematycznych . - Technologia informacyjna Wymagania wstępne: podstawowe pojęcia informatyki, ogólna budowa komputera.						
Programy						
kierunek: Chemia specjalność: wszystkie specjalności						
Forma zajęć liczba godzin/rygor						
semestr	x- egzamin, + zaliczenie, # projekt					ECTS
	razem	wykłady	ćwiczenia	laboratoria	projekt	seminarium
V	30	16 / +	14 / +			
Autor						
Prof. dr hab. inż. Waldemar Trzciński						
Bilans ECTS						
Lp.	Aktywność					Obciążenie w godz.
1	Udział w wykładach					16
2	Samodzielne studiowanie tematyki wykładów					20
3	Udział w ćwiczeniach					14
4	Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń					18
5	Udział w laboratoriach					
6	Samodzielne przygotowanie się do laboratoriów					
7	Udział w seminariach					
8	Samodzielne przygotowanie się do seminariów					
9	Realizacja projektu					
10	Udział w konsultacjach					10
11	Przygotowanie do egzaminu					
12	Udział w egzaminie					
					Godz.	ECTS
Sumaryczne obciążenie pracą studenta					78	3

Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1+3+5+7+9+10+12	40	1,5
Zajęcia o charakterze praktycznym: 5+6+9		
Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 1+2+3+4+7+8	68	2,5

AUTOR
KARTY INFORMACYJNEJ


Prof. dr hab. inż. Waldemar TRZCIŃSKI

KIEROWNIK JEDNOSTKI ORGANIZACYJNEJ
ODPOWIEDZIALNEJ ZA PRZEDMIOT


Prof. dr hab. inż. Jerzy CHOMA