

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: Metody obliczeniowe w chemii (WTCCXCSI-MO)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Numerical methods in chemistry

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Przedmiot dla jednostki: Wydział Nowych Technologii i Chemii
Cykl dydaktyczny: Semestr zimowy 2025/2026
Koordynator przedmiotu cyklu: prof. dr hab. inż. Waldemar Trzciński

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Zaliczenie na ocenę

Język wykładowy:

polski

Skrócony opis:

Celem przedmiotu jest nauczanie studentów rozwiązywania zadań i problemów występujących w chemii za pomocą własnych programów komputerowych i z wykorzystaniem pakietów obliczeniowych. W tym celu poznają zasady algorytmizacji obliczeń oraz podstawy platformy obliczeniowej MatLab. Poznają również wybrane metody numeryczne.

Opis:

1. Algorytmizacja obliczeń. Definicja algorytmu, zapis algorytmu w postaci schematu blokowego. W/2 C/2
2. Wprowadzenie do pakietu MatLab. Interfejs pakietu, pliki, tryby użytkownika MatLaba, zmienne, operatory. W/2 C/2
3. Edytor MatLaba, instrukcje sterujące programem. W/2 C/2
4. Wektoryzacja kodu, funkcje, wykresy i grafika W/2 C/2
5. Układy równań liniowych. W/1 C/1
6. Interpolacja i aproksymacja Aproxymacja stałej szybkości reakcji i ciepła właściwego od temperatury. W/2 C/2
7. Przybliżone rozwiązywanie równań nieliniowych (metody siecznych i stycznych). Minimum funkcji jednej zmiennej. W/2 C/2
8. Całkowanie numeryczne, rozwiązanie równania różniczkowego zwyczajnego. W/2 C/1
9. Kolokwium zaliczeniowe W/1

Literatura:

podstawowa:

1. Z. Pakowski, M. Głębowski, Symulacja procesów inżynierii chemicznej, Politechnika Łódzka, 2001
2. M. Stachurski, Metody numeryczne w MATLAB, MIKOM, 2003.
3. Anna Tatarczak, Programowanie w MATLAB, Innovatio Press, Lublin 2021.
4. B. Mrozek, Z. Mrozek, MATLAB i Simulink - poradnik użytkownika, Helion, 2018.

uzupełniająca:

1. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, Metody numeryczne, Politechnika Warszawska, 1993.
2. A. Szatkowski, J. Cichosz, Metody numeryczne - Podstawy teoretyczne, Wydawnictwo Politechnik Gdańskiej, 2002.

Efekty uczenia się:

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 inżynierii i technologii chemicznej, 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
U3 - Potrafi planować i organizować pracę indywidualną oraz w zespole, K_U15
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_K02

Metody i kryteria oceniania:

Przedmiot zaliczany jest na podstawie wyników z kolokwium i zaliczenia ćwiczeń.
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.
Efekty U1, U2, U3 i K2 sprawdzane są w trakcie realizacji ćwiczeń.

Praktyki zawodowe:

brak

Forma studiów

stacjonarne

Rodzaj studiów

I stopnia

Rodzaj przedmiotu

obowiązkowy

Przedmioty wprowadzające

Matematyka
Technologia informacyjna
Chemia ogólna i nieorganiczna

Programy

I / Chemia / Materiały wybuchowe i pirotechnika
I / Chemia / Materiały niebezpieczne i ratownictwo chemiczne

Forma zajęć liczba godzin/rygor
W 16/+ C 14/+
Autor
prof dr hab. inż. Waldemar Trzeciński
Bilans ECTS
1. Udział w wykładach / 16 2. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów / 14 3. Udział w ćwiczeniach / 14 4. Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń / 20 5. Udział w konsultacjach / 4 6. Przygotowanie do zaliczenia wykładów / 18 Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 86 / 3 ECTS Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1. + 3. + 5. = 34 / 1,5 ECTS Zajęcia o charakterze praktycznym: 3. + 4. = 34 / 1,5 ECTS

Dane dotyczące przedmiotu cyklu:

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:
Zaliczenie na ocenę