

„ZATWIERDZAM”

.....

.....

KARTA INFORMACYJNA PRZEDMIOTU

nazwa przedmiotu	Metody obliczeniowe w chemii	Numerical methods in chemistry
Kod przedmiotu	WTCCXCSI-MO	
Język wykładowy	polski	
Profil studiów	ogólnoakademicki	
Forma studiów	stacjonarne	
Poziom studiów	studia I stopnia	
Rodzaj przedmiotu	obowiązkowy	
Obowiązuje od naboru	2020/2021	
Forma zajęć, liczba godzin/rygor, razem godz., pkt ECTS	W 16/+, C 14/+, razem: 30 godz., 3 pkt ECTS	
Przedmioty wprowadzające	Chemia ogólna i nieorganiczna Wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć, wielkości i zależności termochemii i termodynamiki chemicznej. Matematyka Wymagania wstępne: znajomość podstawowych pojęć i operacji matematycznych . Technologia informacyjna Wymagania wstępne: podstawowe pojęcia informatyki, ogólna budowa komputera.	
Semestr/kierunek studiów	semestr V / kierunek studiów: Chemia specjalność: Materiały niebezpieczne i ratownictwo chemiczne Materiały wybuchowe i pirotechnika	
Autor	Prof. dr hab. inż. Waldemar Trzciński	
Jednostka organizacyjna odpowiedzialna za przedmiot	Wydział Nowych Technologii i Chemii, Instytut Chemii	
Skrócony opis przedmiotu	Poznanie zasad algorytmizacji obliczeń oraz platformy MatLab. Poznanie wybranych metod numerycznych. Rozwiązywanie zadań i problemów z zakresu chemii za pomocą własnych programów komputerowych.	
Pełny opis przedmiotu (treści programowe)	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 Aproksymacja 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 2019. 4. B. Mrożek, Z. Mrożek, 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 (sposób sprawdzania osiągnięcia przez studenta zakładanych efektów uczenia się)	Przedmiot zaliczany jest na podstawie wyników z kolokwium. Student odpowiada na 5 pytań. 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. 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 W1, U1, U2, U3 i K2 oceniane są w trakcie realizacji ćwiczeń i na podstawie sprawozdań z ćwiczeń
Bilans ECTS (nakład pracy studenta)	Aktywność / obciążenie studenta w godz. 1. Udział w wykładach / 16 2. Udział w ćwiczeniach / 14 3. Samodzielne studiowanie tematyki wykładów / 10 4. Samodzielne przygotowanie do ćwiczeń / 20 5. Samodzielne przygotowanie do zaliczenia / 20 Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 80 godz./ 3 ECTS Zajęcia z udziałem nauczycieli (1+2): 30 godz./ 1 ECTS Zajęcia o charakterze praktycznym 34 godz./ 1 ECTS

autor

kierownik
jednostki organizacyjnej odpowiedzialnej za przedmiot

.....

.....