

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: **Metody obliczeniowe w chemii (WTCCXCSI-MO-2728Z)**

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 2027/2028
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 nauczenie 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 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:

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. 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:

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 / 6
 3. Udział w ćwiczeniach / 14
 4. Samodzielne przygotowanie się do ćwiczeń / 10
 5. Przygotowanie do zaliczenia wykładów / 14
- Sumaryczne obciążenie pracą studenta: 60 / 2 ECTS
Zajęcia z udziałem nauczycieli: 1. + 3. = 30 / 1 ECTS
Zajęcia powiązane z działalnością naukową: 60 / 2 ECTS

Dane dotyczące przedmiotu cyklu:**Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:**

Zaliczenie na ocenę