



Wydział	Wydział Chemiczny
Studia	III stopnia (doktoranckie)
Dyscyplina	Inżynieria chemiczna

KARTA MODUŁU

Nazwa modułu		Obliczenia komputerowe i metody numeryczne w inżynierii chemicznej.			
Kod modułu		Grupa przedmiotów	Moduły kierunkowe		
Koordynator modułu		Prof. Krzysztof Kaczmarcki			
Osoby prowadzące zajęcia		Prof. Krzysztof Kaczmarcki			
Wymiar i forma zajęć		Wykład, 20 godzin			
Rok studiów	2-4	Semestr	IV-VII	Obowiązuje od roku akademickiego	2016/2017
Opis efektów kształcenia dla modułu					
Nr efektu kształcenia	Doktorant, który zaliczył moduł wie/umie/potrafi		Symbol efektu	Sposób weryfikacji efektów kształcenia	
1	Ma podstawową wiedzę na temat rozwiązywania wybranych zagadnień matematycznych metodami numerycznymi.			egzamin	
2	Potrafi zaproponować algorytm numerycznego rozwiązania prostych modeli procesów inżynierii chemicznej.			egzamin	
Treści modułu (program zajęć)					
<p>Źródła błędów w obliczeniach numerycznych, błąd bezwzględny i względny. Zaokrąglanie i ucinanie liczb, przykłady przenoszenia się błędów podczas wykonywania czterech podstawowych działań na komputerze. Ogólny wzór na przenoszenie się błędów, błąd maksymalny i standardowy. Reprezentacja zmiennie i stałopozycyjna. Wskaźniki uwarunkowania dla zadań i algorytmów. Stabilność metody numerycznej, przykłady algorytmów niestabilnych. Transponowanie, suma, różnica, mnożenie i odwracanie macierzy, wyznacznik</p>					

<p>macierzy. Rozwiązywanie układów równań liniowych – eliminacja Gaussa. Metoda eliminacji Gaussa - obliczenie macierzy odwrotnej do danej. Inne metody rozwiązywania układów równań liniowych. Metody iteracyjne dla rozwiązania układów równań. Układy równań liniowych z macierzą trójprzekątniową. Interpolacja, aproksymacja, ekstrapolacja. Wzór interpolacyjny Lagrangea, wzór interpolacyjny Newtona. Problemy obliczeniowe przy stosowaniu metod interpolacyjnych bazujących na węzłach równoodległych. Funkcja sklejana, metoda interpolacji za pomocą funkcji sklejaney. Aproksymacja jednostajna i średniokwadratowa. Metody numeryczne znajdowania zer jednowymiarowej, nieliniowej funkcji algebraicznej. Metody bisekcji, Newtona i siecznych znajdowania zer funkcji. Znajdowanie ekstremów funkcji wielu zmiennych metodą Newtona, Powella, Simplex. Zastosowanie metody algorytmów genetycznych do znajdowanie ekstremów funkcji wielu zmiennych. Całkowanie numeryczne: metoda prostokątów, trapezów, Simpsona, Romberga, kwadratury Gaussa. Metody rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych: metoda Eulera Rungego-Kutty. Idee rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych metodami różnicowymi.</p>	
Wymagania wstępne i dodatkowe	
Zaliczony kurs matematyki dla studentów kierunku inżynierii chemicznej.	
Zalecana literatura i pomoce naukowe	
<p>Metody numeryczne, Fortuna Zenon, Macukow Bohdan, Wąsowski Janusz, WNT 2016</p> <p>D. Kincaid, W. Cheney, <i>Analiza numeryczna</i>, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa 2006</p> <p>A. Björck, G. Dahlquist, <i>Metody numeryczne</i>, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1987</p>	
Nakład pracy doktoranta (bilans punktów ECTS)	
Forma nakładu pracy doktoranta (udział w zajęciach, przygotowanie do zajęć, przygotowanie prezentacji, przygotowanie do zaliczenia, przygotowanie do egzaminu, egzamin itp.)	Obciążenie doktoranta [h]
Udział w zajęciach	20h
Przygotowanie do egzaminu	10h

Sumaryczne obciążenie pracą doktoranta	30h
Punkty ECTS za moduł	6
Warunki zaliczenia modułu i ocena końcowa (OK): Zdanie egzaminu na ocenę co najmniej dostateczny (3,0). Ocena z egzaminu jest oceną końcową.	
Uwagi:	