



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 Kaczmarski			
Osoby prowadzące zajęcia		Prof. Krzysztof Kaczmarski			
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)

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 zmienna i stałopozycyjna.
Wskaźniki uwarunkowania dla zadań i algorytmów.
Stabilność metody numerycznej, przykłady algorytmów niestabilnych.
Transponowanie, suma, różnica, mnożenie i odwracanie macierzy, wyznacznik 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.

<p>Układy równań liniowych z macierzą trójkątną.</p> <p>Interpolacja, aproksymacja, ekstrapolacja.</p> <p>Wzór interpolacyjny Lagrangea, wzór interpolacyjny Newtona.</p> <p>Problemy obliczeniowe przy stosowaniu metod interpolacyjnych bazujących na węzłach równoodległych.</p> <p>Funkcja sklejana, metoda interpolacji za pomocą funkcji sklepanej.</p> <p>Aproksymacja jednostajna i średniokwadratowa.</p> <p>Metody numeryczne znajdowania zer jednowymiarowej, nieliniowej funkcji algebraicznej. Metody bisekcji, Newtona i siecznych znajdowania zer funkcji.</p> <p>Znalezienie ekstremów funkcji wielu zmiennych metodą Newtona, Powella, Simplex.</p> <p>Zastosowanie metody algorytmów genetycznych do znajdowania ekstremów funkcji wielu zmiennych.</p> <p>Całkowanie numeryczne: metoda prostokątów, trapezów, Simpsona, Romberga, kwadratury Gaussa.</p> <p>Metody rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych: metoda Eulera Rungego-Kutty.</p> <p>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:	