



Introduktion till datormodellering Introduction to Computational Modelling

7,5 högskolepoäng

7,5 credits

Ladokkod: 42RI07

Version: 1.2

Fastställt av: Utskottet för utbildningar inom teknik 2015-12-18

Gäller från: VT 2016

Nivå: Avancerad nivå

Huvudområde (successiv fördjupning): Kemiteknik (A1N)

Utbildningsområde: Teknik

Ämnesgrupp: Övriga tekniska ämnen

Förkunskapskrav: Uppfyller antagningskraven till Masterprogrammet i resursåtervinning (eller motsvarande).

Betygsskala: Sjugradig betygsskala (A-F)

Innehåll

Kursen behandlar termodynamiska storheter som entalpi, entropi och Gibbs energi. Vidare behandlas reaktionskinetik och molekylär modellering, till exempel molekylmekanikmodellering, molekylodynamikmodellering och Monte Carlo-metoder. Dessutom läggs stor vikt vid termokemisk modellering av processer relaterade till resursåtervinning, t.ex. förbränning.

Mål

Studenten ska efter genomgången kurs kunna:

1 Kunskap och förståelse

- 1.1 redogöra för grunderna i termodynamik och kemisk jämvikt,
- 1.2 redogöra för grunderna i molekylär dynamik och Monte Carlo metoder,
- 1.3 redogöra för grunderna inom makroskopisk modellering under jämviktstillstånd,

2 Färdighet och förmåga

- 2.1 med säkerhet hantera teori och beräkningar inom termodynamik och kemisk jämvikt,
- 2.2 med säkerhet hantera teori och beräkningar inom reaktionskinetik,
- 2.3 genomföra ett datormodelleringsprojekt på molekylär eller makroskopisk nivå,

3 Värderingsförmåga och förhållningssätt

- 3.1 förstå styrkor och begränsningar av datormodellering som ett verktyg i industrin.

Undervisningsformer

Undervisningen består av föreläsningar med övningstillfällen, datorlaborationer och projektarbete.

Undervisningen bedrivs på engelska.

Examinationsformer

Kursen examineras genom följande examinationsmoment:

Tentamen - (Samtliga mål)

Lärandemål:

Högskolepoäng: 4

Betygsskala: Sjugradig betygsskala (A-F)

Projektarbete - (Mål 2.3)

Lärandemål:

Högskolepoäng: 3

Betygsskala: Underkänd eller Godkänd

Seminarium - (Mål 2.1, 3.1)

Lärandemål:

Högskolepoäng: 0,5

Betygsskala: Underkänd eller Godkänd

Examinationsmomentet Tentamen bestämmer kursens slutbetyg vilket utfärdas först när samtliga moment är godkända.

Studentens rättigheter och skyldigheter vid examination är enligt riktlinjer och regelverk vid Högskolan i Borås.

Kurslitteratur och övriga läromedel

Rekommenderad litteratur:

Andrew R. Leach Molecular Modelling: *Principles and Applications*, 2nd. ed., Harlow: Prentice Hall, 2001.

Hans Lukas, Suzana G. Fries, Bo Sundman, Computational Thermodynamics: *The Calphad method*, Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

Utdelat material

Studentinflytande och utvärdering

Akademichef och kursansvarig lärare ansvarar för att studenternas synpunkter på kursen systematiskt och regelbundet inhämtas. Resultaten av utvärderingarna återförs till studenterna och ska ligga till grund för kursens framtida utformning.

Övrigt