



## Introduktion till datormodellering Introduction to Computational Modelling

7,5 högskolepoäng

7,5 credits

---

**Ladokkod:** 42RI07

**Version:** 3.0

**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 övningsstillfällen, 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**