

**Przedmiot: Modelowanie i symulacja w mezo i molekularnej skali****Kod przedmiotu: WTiCh/ISt/ICh/D1-6****Odpowiedzialny za przedmiot, jego miejsce zatrudnienia i e-mail:** dr hab. inż. Józef Nastaj, prof. PS, Zakład Inżynierii Procesowej, Informatyki Procesowej i Ochrony Atmosfery, Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska, e-mail : jonas@ps.pl

- 1. Język wykładowy:** polski
- 2. Liczba punktów:** 3
- 3. Rodzaj studiów, kierunek, specjalność:** studia II stopnia, stacjonarne, kierunek Inżynieria Chemiczna i Procesowa, specjalność Informatyka procesowa
- 4. Status przedmiotu dla ww. studiów:** obowiązkowy
- 5. Informacje o formach zajęć:**

Sem.	Pkt	Zajęcia praktyczne									
		Wykład		Seminarium		Ćw/ćw. komp.		Laboratorium		Projekt	
		G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.	G/sem	F.z.
II	3	15	Z			30	Z				
Waga		0,6				0,4					

Objaśnienia: Pkt – liczba punktów, G/sem. – liczba godzin w semestrze, F.z. – forma zaliczenia zajęć (E – egzamin, Z – zaliczenie). Ćw. komp – zajęcia w formie ćwiczeń, na stanowiskach komputerowych

- 7. Wymagane zaliczenie przedmiotów poprzedzających (lub określenie wymaganej wiedzy):** Zaawansowane metody matematyczne w modelowaniu procesów, termodynamika chemiczna i procesowa, chemia fizyczna.

**8. Program wykładów**

Teoretyczne i obliczeniowe aspekty modelowania w skali mezo- i molekularnej. Podstawowe pojęcia. Metody symulacji komputerowej. Zaawansowane metody matematyczne i numeryczne stosowane przy modelowaniu w skali mezo i molekularnej. Symulacja molekularna za pomocą zaawansowanych metod Monte Carlo. Kinetyka i równowaga adsorpcji na poziomie mikro i makroskopowej skali. Modelowanie i projektowanie nanostrukturalnych adsorbentów. Symulacja właściwości termofizycznych w skali molekularnej, zastosowanie teorii związanych z symulacją przemian fazowych. Zastosowanie modelowania molekularnego w inżynierii chemicznej: przeróbka ropy naftowej, rozwój nowych katalizatorów, leków, usuwanie siarki z benzyny metodą ekstrakcyjną w układzie ciecz/ciecz, etc. Przewidywanie struktury białek, projektowanie nowych cząsteczek.

**9. Program zajęć praktycznych**

Wybrane praktyczne metody symulacji komputerowej. Zastosowanie praktyczne zaawansowanych metod matematycznych i numerycznych stosowanych w modelowaniu w skali mezo i molekularnej. Symulacja wybranych układów: równowaga i kinetyka adsorpcji w skali mikro i makroskopowej, symulacja właściwości termofizycznych w skali molekularnej. Wybrane programy narzędziowe stosowane w modelowaniu w skali mikro i mezomolekularnej.

**10. Literatura**

1. Leach A., Molecular Modelling: Principles and Applications, 2/E, Prentice Hall, New York 2001.
2. Rice R.G., Do D.D., Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers, John Wiley & Sons, New York 1995.
3. J.M. Prausnitz, R.N. Lihthenhaler, E. Gomes de Azevedo, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, Third Edition, Prentice Hall PTR, New Jersey 1999.