

ΦΥΛΛΟ ΤΑΥΤΟΤΗΤΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Κωδ. Αριθ. ΑΕΙ

Τίτλος

Σκοπός

Στοιχεία Μαθήματος	Τ.Π	Ενοτ.Μαθ.	ΕΞ	<input type="text" value="4°"/>	ΥΠΧ	<input type="text" value="√"/>	Ω / Ε	<input type="text" value="2"/>
<input type="text" value="ΧΜ"/>		ΒΑ.ΕΠ			ΥΠΧ	<input type="text" value="√"/>	ΘΕ	<input type="text" value="2"/>
		ΤΕ.ΕΠ		<input type="text" value="√"/>	ΕΠΛ	<input type="text" value=""/>	ΦΡ	<input type="text" value=""/>
		ΤΧΛ.		<input type="text" value=""/>	Π.ΤΜ	<input type="text" value="√"/>	ΕΡΓ	<input type="text" value="2"/>
		Ο.Α.Κ.		<input type="text" value=""/>			ΥΠΛ	<input type="text" value="4"/>
		Ξ.Γ.		<input type="text" value=""/>				

Προαπαιτούμενες γνώσεις

Διδάσκοντες

Μέθοδος Διεξαγωγής

Το μάθημα διδάσκεται και στη Τάξη (αμφιθέατρο) αλλά και στο Εργαστήριο Προσωπικών Υπολογιστών (ΕΠΥ/PCLAB) της Σχολής, σε ποσοστό 50%. Οι φοιτητές χωρίζονται σε 2 τμήματα και διδάσκονται και ασκούνται, "hands on" στους Η/Υ του PCLAB

Το μάθημα παρακολουθείται από 200 άτομα που χωρίζονται σε 2 τμήματα (100 φοιτητές/τμήμα).

Η κατανομή της ύλης γίνεται σύμφωνα με τον πίνακα που ακολουθεί.

Κατά τη διάρκεια του εργαστηρίου (2 ώρες/εβδομάδα/τμήμα) κάθε τμήμα χωρίζεται σε 5 ομάδες των 20 (=100/5) φοιτητών η καθεμιά. Οι φοιτητές καλούνται να αναπτύξουν, μόνοι τους, κώδικες υπολογιστικής ανάλυσης (3 – 10, ανάλογα με τη δυσκολία) MATLAB πάνω στην θεωρία που διδάχτηκαν υπό την επίβλεψη επικουρικού προσωπικού για κάθε ομάδα. Απαιτούμενο επικουρικό προσωπικό: **5 άτομα/ τμήμα / εβδομάδα = 5 άτομα με 4-ωρη απασχόληση /εβδομάδα.**

Κατανομή ύλης

Ιστοσελίδα Μαθήματος (site)

http://www.chemeng.ntua.gr/the_course/Computational_Methods_for_Engineers

1η εβδομάδα	Εισαγωγή: Μαθηματική μοντελοποίηση και υπολογιστική επίλυση προβλημάτων μηχανικού <ul style="list-style-type: none">○ Γενικά προβλήματα μηχανικού που διέπονται από νόμους διατήρησης<ul style="list-style-type: none">▪ Αναλυτική – αριθμητική επίλυση○ Σφάλματα αριθμητικών υπολογισμών<ul style="list-style-type: none">▪ σφάλμα στρογγυλοποίησης (round-off error)▪ σφάλμα αποκοπής (truncation error).▪ μετάδοση σφάλματος, συνολικό σφάλμα
2η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none">○ Εισαγωγή στο υπολογιστικό εργαστήριο:<ul style="list-style-type: none">▪ Εισαγωγή στο Matlab (πράξεις, χρήση μεταβλητών, προγραμματισμός, γραφικές παραστάσεις)
3η εβδομάδα	Υπολογιστική επίλυση αλγεβρικών εξισώσεων <ul style="list-style-type: none">○ Γραμμικές εξισώσεις-συστήματα εξισώσεων<ul style="list-style-type: none">▪ Απαλοιφή Gauss▪ Παραγοντοποίηση LU (LU_factorization), αντιστροφή πίνακα▪ Ειδικές μορφές πινάκων, Gauss-Seidel
4η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none">▪ Υπολογιστικό εργαστήριο:<ul style="list-style-type: none">• Επίλυση γραμμικών συστημάτων• Προβλήματα Χημικής Μηχανικής: Δίκτυο αντιδραστήρων
5η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none">○ Μη γραμμικές εξισώσεις<ul style="list-style-type: none">▪ Κλειστές μέθοδοι (Bracketing Methods)▪ Ανοικτές μέθοδοι (Open Methods)
6η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none">▪ Ρίζες πολυωνύμων▪ Πολλαπλότητα ριζών▪ Συστήματα μη γραμμικών εξισώσεων▪ Παραδείγματα Χημικής Μηχανικής στο υπολογιστικό εργαστήριο: Χημική κινητική συστήματος αντιδράσεων

7η εβδομάδα	<p>1. Προσαρμογή Καμπυλών (curve fitting)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων ○ Προσέγγιση Fourier ○ Παρεμβολή (Interpolation). (πολυωνυμική, splines) ○ Υπολογιστικό εργαστήριο : Υπολογιστικό εργαστήριο: Εύρεση κινητικής ενζυμικών αντιδράσεων από πειραματικές μετρήσεις,
8η εβδομάδα	<p>1. Αριθμητική/Προσεγγιστική Παραγωγή και Ολοκλήρωση</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Παραγωγή <ul style="list-style-type: none"> ▪ Πεπερασμένες διαφορές ▪ Προεκβολή Richardson (Richardson extrapolation) ○ Ολοκλήρωση <ul style="list-style-type: none"> ▪ Μέθοδος Τραπεζίου ▪ Μέθοδος Simpson ▪ Μέθοδος Romberg ▪ Μέθοδος Gauss (Gauss quadrature) ○ Υπολογιστικό εργαστήριο: υπολογισμός έργου δύναμης – υπολογισμός διανυσματικού πεδίου από δυναμικό
9η εβδομάδα	<p>1. Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις (Ordinary differential equations) Προβλήματα αρχικών τιμών</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Μέθοδος Euler <ul style="list-style-type: none"> ▪ Explicit Euler ▪ Implicit Euler ○ Μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης (predictor-corrector) ○ Μέθοδος Runge – Kutta
10η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Υπολογιστικό εργαστήριο: Αντιδραστήρας συνεχούς και πλήρους ανάμιξης (CSTR)
11η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none"> ○ Συστήματα εξισώσεων ○ Αριθμητική ευστάθεια ○ Υπολογιστικό εργαστήριο : Το σύστημα ‘θηρευτής – θήραμα’ (Predator – Prey model), χαστική δυναμική ○
12η εβδομάδα	<p>2. Προβλήματα συνοριακών τιμών</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών ○ Συστήματα εξισώσεων ○ Υπολογιστικό εργαστήριο
13η εβδομάδα	<ul style="list-style-type: none"> ○ Υπολογιστικό εργαστήριο: Υπολογιστικό θέμα – Παρουσίαση – Εκπόνηση

**Διδακτικά
Συγγράμματα**

1. "Αριθμητικές Μέθοδοι για Μηχανικούς", S. Chapra and R. Canale, εκδ. Α. ΤΖΙΟΛΑ & ΥΙΟΙ Α.Ε., 2014
2. "Αριθμητικές μέθοδοι για προβλήματα μηχανικής", Π. Νταουτίδης, Σ. Μαστρογεωργόπουλος, Ε. Σιδηροπούλου, εκδ. ΑΝΙΚΟΥΛΑ, 2010.

**Διδακτικό
Βοήθημα**

**Προτεινόμενη
Βιβλιογραφία**

**Αξιολόγηση
Επίδοσης**

Διαγώνισμα στο PCLAB στο μέσο του εξαμήνου, προαιρετικά. Τελική 'ηλεκτρονική' εξέταση στο τέλος του εξαμήνου.

Φοιτητές παλαιότερων ετών μπορούν να επιλέγουν μεταξύ του νέου (ηλεκτρονικά) και του παραδοσιακού (γραπτά) τρόπου εξέτασης.

**Ενιαίος
Βαθμός**

Ο τελικός βαθμός προκύπτει από το τελικό διαγώνισμα. Εναλλακτικά, κατά 40% από το προαιρετικό διαγώνισμα στο μέσο του εξαμήνου και κατά 60% από το τελικό διαγώνισμα.