**Nazwa przedmiotu:**

Informatyka przemysłowa

**Koordynator przedmiotu:**

dr inż. Kamil Paduszyński

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia I stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna - profil praktyczny

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

3 / rok ak. 2020/2021

**Liczba punktów ECTS:**

2

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

-

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

-

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

-

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład: | 0h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 30h |
| Projekt: | 0h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

brak

**Limit liczby studentów:**

brak

**Cel przedmiotu:**

Laboratorium komputerowe wprowadza studentów w ogólne podstawy programowania, w oparciu o narzędzia dostępne w zintegrowanym środowisku Matlab/Simulink. Szczególny nacisk położony zostanie na zastosowanie zdobytych umiejętności do opisu i modelowania problemów istotnych z punktu widzenia chemii oraz inżynierii chemicznej.

**Treści kształcenia:**

Na przedmiot składa się 15 pracowni, w tym ewentualnie jedna pracowania przeznaczona na zaliczenie. Tematyka poszczególnych pracowni przedstawia się następująco:
1. (Lab. 1-4) Podstawy programowania w środowisku Matlab:
a. typy zmiennych: liczbowe (skalary, wektory, macierze), logiczne, tekstowe oraz hybrydowe (komórki, tabele);
b. elementarne funkcje matematyczne;
c. ładowanie i zapis danych z/do plików MAT;
d. operatory arytmetyczne i logiczne;
e. indeksowanie oraz filtrowanie danych z użyciem zmiennych logicznych;
f. tworzenie skryptów i funkcji;
g. instrukcje warunkowe, pętle, obsługa wyjątków;
h. odczyt/zapis z/do plików, współpraca z programem MS Excel;
i. wizualizacja danych, wykresy 2D i 3D – tworzenie, formatowanie, wydruk do pliku.
2. (Lab. 5-8) Metody numeryczne:
a. algebra liniowa: działania na macierzach, rozwiązywanie układów równań liniowych;
b. rozwiązywanie równań i układów równań nieliniowych;
c. różniczkowanie i całkowanie numeryczne;
d. rozwiązywania równań i układów równań różniczkowych zwyczajnych;
e. optymalizacja modeli nielinowych – nieliniowa metoda najmniejszych kwadratów oraz algorytm „simplex”.
3. (Lab. 9-12) Metody statystyczne:
a. statystyka opisowa danych wielowymiarowych – średnia, kowariancja, itp.;
b. generowanie liczb pseudolosowych z różnych rozkładów;
c. regresja danych metodą najmniejszych kwadratów oraz interpretacja wyników (np. test istotności współczynników modelu, diagnostyka modelu);
d. klasyfikacja danych na przykładzie metody LDA;
e. regresja i klasyfikacja danych w
f. wizualizacja danych oraz ich statystyk – histogramy, wykresy pudełkowe, itp.
4. (Lab. 13-15) Wprowadzenie do środowiska Simulink.
W ramach każdej pracowni, przedstawione zostaną przykłady zastosowań zagadnień czysto programistycznych w praktycznych problemach natury inżynierskiej, z dziedziny chemii oraz inżynierii chemicznej, m.in.:
• filtrowanie danych fizykochemicznych z udostępnionych baz danych (np. screening w poszukiwaniu najlepszego rozpuszczalnika na podstawie danych nt. parametru rozpuszczalności – lab. 1-4;
• bilansowanie równań reakcji chemicznych, poszukiwanie reakcji niezależnych, badanie kinetyki chemicznej w układzie z wieloma reakcjami, bilansowanie równowag chemicznych, dobieranie parametrów modeli nieliniowych (np. opis danych lepkości w funkcji temperatury równaniem VTF) – lab. 5-8;
• wspomagane komputerowo projektowanie molekularne w oparciu o modele QSPR/QSAR – lab. 9-12;
• symulacja wybranego procesu jednostkowego (np. destylacja rzutowa) w programie Simulink i/lub symulacja układ regulacji PID – lab 13-15.
Z uwagi na ograniczenia czasowe, podczas każdej z pracowni, prowadzący udostępnia gotowe pliki z przykładami, na podstawie których prezentowane są omawiane zagadnienia.
Prowadzący zastrzega, że treści merytoryczne mogą ulec drobnym modyfikacjom lub poszerzeniu.

**Metody oceny:**

1. Formą zaliczenia jest kolokwium, które odbędzie się w jednej z form:
a. w pracowni komputerowej w czasie ostatnich zajęć;
b. zdalnie, w godzinach wspólnie ustalonych przez prowadzącego i studentów poprzez platformę internetową – wówczas każdy ze studentów otrzyma inny zestaw tematów.
2. Kolokwium będzie trwało 1 h 45 min.
3. Na kolokwium składać się będzie kilka tematów, które sprawdzą czy zostały osiągnięte założone efekty kształcenia, tj. czy student:
a. zna podstawowe pojęcia związane z samym programowaniem i składnią przedstawionego narzędzia programistycznego;
b. potrafi przetłumaczyć rzeczywisty problem inżynierski na język abstrakcji, tj. na kod programu.
4. Lista wszystkich tematów, które będą mogły pojawić się w punkcie 2b zostanie przedstawiona odpowiednio wcześniej przed zaliczeniem. Podczas kolokwium zostanie wybrany (losowo) jeden z problemów.
5. Rozliczenie kolokwium obędzie się w oparciu o ocenę plików utworzonych przez studenta w na podstawie tematów zaliczeniowych, a następnie przesłaniu ich za pośrednictwem poczty elektronicznej lub sieci lokalnej do prowadzącego zajęcia.
6. Kolokwium uznaje się za zaliczone, jeśli liczba punktów jest niemniejsza niż 50% całkowitej puli. Wyższe oceny będą wystawiane w oparciu o następujące progi: >= 50%, 3.0; >= 60%, 3.5; >= 70%, 4.0; >= 80%, 4.5; >=90%, 5.0.
7. Do kolokwium będzie można przystąpić dwa razy. Ocenę końcową stanowić będzie ocena korzystniejsza.
8. Prowadzący dopuszcza się możliwość zdobycia dodatkowych punktów na konto zaliczenia, np. tytułem wyróżniającej się aktywności na zajęcia lub rozwiązywania prac domowych.

**Egzamin:**

nie

**Literatura:**

1. R. Pratap: „MATLAB 7 dla naukowców i inżynierów”, Wyd. Mikom, Warszawa 2007
2. J. Brzózka, L. Dorobczyński: „MATLAB : środowisko obliczeń naukowo-technicznych”, Wyd. Mikom, Warszawa 2005.
3. Materiały udostępnione przez prowadzącego (slajdy, pliki, itp.).

**Witryna www przedmiotu:**

ch.pw.edu.pl

**Uwagi:**

Po ukończeniu przedmiotu student powinien:
1. Pisać programy (skrypty i funkcje) z wykorzystaniem podstawowych elementów każdego języka programowania, tj. instrukcji warunkowych, pętli, obsługi wyjątków, import/eksport/wizualizacja danych itp.
2. Potrafić zastosować umiejętność programowania w rozwiązywaniu inżynierskich problemów obliczeniowych o umiarkowanym stopniu złożoności.
3. Potrafić przełożyć problem zdefiniowany w ramach podstawowych dziedzin chemii (np. termodynamika lub kinetyka chemiczna) na algorytm, a następnie na kod i odpowiednie funkcje dostępnych narzędziach programistycznych.

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

Posiada podstawową wiedzę z zakresu technologii informacyjnych, w tym znajomość pakietów oprogramowania przydatnych w działalności inżynierskie

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

Potrafi posługiwać się podstawowymi technikami informacyjno-komunikacyjnymi, w tym programami komputerowymi wspomagającymi realizację zadań inżynierskich z zakresu technologii chemicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

Ma świadomość poziomu swojej wiedzy i umiejętności, rozumie potrzebę ciągłego dokształcania się - podnoszenia kompetencji zawodowych i osobistych, potrafi określić kierunki dalszego uczenia się i realizować proces samokształcenia

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:**

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**