

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ім. ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Хіміко-технологічний факультет

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан хіміко-технологічного
факультету

_____ І.М. Астрелін
(підпис)

“22” червня 2018 р.

_____ (підпис) _____ (ініціали, прізвище)

“ ” 201 р.

**"Комп'ютерні технології в процесах неорганічних
виробництв та водоочищення"**

_____ (назва кредитного модуля)

**РОБОЧА ПРОГРАМА
кредитного модуля**

рівень вищої освіти другий (магістерський)
спеціальність 161 Хімічні технології та інженерія
(шифр і назва)

освітня програма хімічні технології та інженерія
(ОПІ/ОНП, назва)

спеціалізація Хімічні технології неорганічних речовин та
водоочищення
(назва)

форма навчання денна
(денна/заочна)

Ухвалено методичною комісією
хіміко-технологічного факультету
(назва інституту/факультету)

Протокол від 21 червня 2018 р. № 6

Голова методичної комісії

_____ О.В.Сангінова
(підпис) (ініціали, прізвище)

«21» червня 2018 р.

Київ – 2018

Робоча програма кредитного модуля "Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення "

(назва кредитного модуля)

складена відповідно до програми навчальної дисципліни "Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення ".

(назва навчальної дисципліни та код за ОП)

Розробники робочої програми:

Доцент, к.т.н. Концевой Андрій Леонідович

(підпис)

Доцент, к.т.н. Концевой Сергій Андрійович

(підпис)

Робочу програму затверджено на засіданні кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології
Протокол від «13» червня 2018 року № 13

В/о завідувача кафедри

_____ Н.М. Толстопалова
(підпис) (ініціали, прізвище)

« 13» червня 2018 р.

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018 рік
© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 20__ рік

1. Опис кредитного модуля

Рівень ВО, спеціальність, освітня програма, форма навчання	Загальні показники	Характеристика кредитного модуля
Рівень ВО <i>Другий (магістерський)</i>	Назва дисципліни <i>Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення</i>	Лекції 9 год.
Спеціальність <i>161 Хімічні технології та інженерія</i>	Цикл <i>Професійної підготовки</i>	Практичні 18 год.
Освітня програма <i>Хімічні технології та інженерія</i>	Статус кредитного модуля <i>За вибором студентів</i>	Лабораторні
Спеціалізація <i>Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення</i>	Семестр 1	Самостійна робота 33 год., у тому числі на виконання індивідуального завдання 8 год.
		Індивідуальне завдання <i>Розрахункова робота</i>
Форма навчання <i>денна</i>	Кількість кредитів 2 (60 годин)	Вид та форма семестрового контролю <i>залік</i>

Кредитний модуль "Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення" призначений активувати застосування студентами ПК в навчальному процесі і, зокрема, при виконанні курсових і дипломного проєктів, поглибити знання і вміння студентів з програмування в середовищі MathCad, мовою Python та R. Необхідність розробки нових алгоритмів сприятиме більш якісному засвоєнню студентами технологічних аспектів дисциплін спеціалізації. При вивченні цього кредитного модуля студенти одержують конкретні фахові знання і вміння з методології побудови алгоритму розрахунку конкретного процесу або об'єкту та реалізації алгоритму в указаних середовищах. Модуль передбачає послідовну і систематичну реалізацію алгоритмів і програм у взаємозв'язку з виконанням індивідуальних завдань технологічного характеру і розрахункової роботи. Навчальний матеріал модуля "Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення" базується на знаннях і вміннях, отриманих при навчанні за бакалаврською програмою підготовки та дисциплін підготовки магістрів 1с «Технологія та обладнання одержання питної та технічної води» та 3с «Хімічна технологія каталізаторів та каталітичних процесів». Дисципліна також сприятиме підготовці студентів до виконання магістерської дисертації.

2. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ КРЕДИТНОГО МОДУЛЯ

2.1. Мета кредитного модуля.

Згідно освітньої програми другого (магістерського) рівня вищої освіти спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія, спеціалізації Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення після засвоєння кредитного модуля «Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв та водоочищення» студент має продемонструвати **здатність** ідентифікувати, одержувати й розміщати необхідні дані, планувати й проводити аналітичні дослідження, моделювання й експеримент, критично оцінювати дані й робити висновки, досліджувати застосування нових технологій у сфері своєї інженерної діяльності

2.2. Основні завдання кредитного модуля.

Студенти після засвоєння цього кредитного модуля мають продемонструвати такі результати навчання:

ЗНАННЯ:

- можливостей ПК в вирішенні розрахункових проблем ХТНР;
- можливостей пакетів Excel та MathCad стосовно рішення математичних моделей різної складності з використанням вбудованих мов програмування;
- послідовності розробки алгоритму та відповідної програми (реалізованої в мові Python) розрахунку матеріального, теплового балансів конкретного виробництва або апарату;
- послідовності конструктивного розрахунку реакторів різного типу;
- методів і програмних принципів розрахунку процесу в кінетичній, зовнішньо-дифузійній і внутрішньо-дифузійній областях;
- методів і програмних принципів статистичної обробки даних та планування експерименту на мові R.

УМІННЯ:

- користуватись стандартним програмним забезпеченням середовища Excel, MathCad, Python та R при вирішенні проблем, пов'язаних з курсовим проектуванням і обробкою даних магістерської дисертації;
- змінити і доповнити алгоритми і програми кафедри ТНР і ЗХТ відповідних розрахунків з теми комп'ютерних занять;
- розробити індивідуально власні програми розрахунків (в тому числі з застосуванням графічних ресурсів) з теми комп'ютерних занять;
- розробити власний алгоритм, написати і налагодити програму розрахунків з теми курсового проекту зі спеціалізації у вказаних вище середовищах;

ДОСВІД: використання методів комп'ютерного моделювання складних систем, обробки даних та планування експерименту.

3. СТРУКТУРА КРЕДИТНОГО МОДУЛЯ

Назви розділів і тем	Кількість годин				
	Всього	у тому числі			
		Лекції	Практичні заняття	Комп'ютер. практикум	СРС
1	2	3	4	5	6
Розділ 1. Математичне моделювання процесів неорганічної технології та водоочищення					
Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel та MathCad	26	4		18	4
Тема 1.2 Універсальна методика розрахунку ХТС в середовищі Python	16	4		6	6
Модульна контрольна робота	4			2	2
Всього за розділом 1	46	8		26	12
Розділ 2. Комп'ютерні системи обробки даних					
Тема 2.1 Статистична обробка результатів експериментів на мові R	13	4		3	6
Тема 2.2 Планування експерименту на мові R	13	4		3	6
Тема 2.3 Використання нейронних мереж для обробки даних	6	2		2	2
Всього за розділом 2	32	10		8	14
Розрахункова робота	8				8
Залік диф.	4			2	2
Всього	90	18	-	36	36

4. ЛЕКЦІЙНІ ЗАНЯТТЯ

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
1	<p>Розділ 1. Математичне моделювання процесів неорганічної технології та водоочищення</p> <p><i>Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel та MathCad</i></p> <p>РОЗРАХУНОК РІВНОВАГИ ОБОРОТНИХ РЕАКЦІЙ В ХТНР. Рішення завдань з вищої математики у MathCad. Програмування у цій системі. Основні переваги та недоліки системи MathCad.</p> <p>Література: 1, 2 – 4.</p> <p>СРС: реалізація алгоритмів розглянутих на лекції у MathCad</p>

2	<p>Реалізація розглянутих завдань у середовищі Excel. Програмування у цій системі. Порівняльний аналіз систем MathCad та Excel.</p> <p>Література: 12.</p> <p>СРС: виконання самостійних завдань з теми лекції</p>
3	<p>Тема 1.2 Універсальна методика (УМ) розрахунку ХТС в середовищі мови Python</p> <p>Алгоритм розрахунку одно та двоступеневої зворотно-осмотичної установки з використанням функцій мови Python в on-line середовищі repl.it або локально в IDLE. Реалізація розрахунку з використанням ітераційного циклу у Python.</p> <p>Завдання на СРС: реалізація алгоритмів розглянутих на лекції у середовищі Python.</p> <p>Література: 6, 7.</p>
4	<p>Алгоритм розрахунку схеми синтезу аміаку згідно УМ. Реалізація розрахунку з використанням ітераційного циклу на мові Python.</p> <p>СРС: реалізація алгоритмів розглянутих на лекції у середовищі електронних таблиць та на мові Python.</p>
5	<p>Розділ 2. Комп'ютерні системи обробки даних</p> <p>Тема 2.1 Статистична обробка результатів експериментів на мові R</p> <p>Основи статистичної обробки даних у середовищі мови R. .</p> <p>Література: 8.</p> <p>СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі stepic.org (курс з програмування на мові R)</p>
6	<p>Основи програмування на мові R.</p> <p>Література: 8.</p> <p>СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі stepic.org (не менш ніж 80% курсу з програмування на мові R)</p>
7	<p>Тема 2.2 Планування експерименту на мові R</p> <p>Можливості середовища R у плануванні експерименту.</p> <p>Література: 9.</p> <p>СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі coursera.org (курс з Data Improving)</p>
8	<p>Повний факторний експеримент в R.</p> <p>Література: 9.</p> <p>СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі coursera.org (курс з Data Improving, не менш ніж 80% проходження)</p>
9	<p>Тема 2.3 Використання нейронних мереж для обробки даних</p> <p>«Хмарне» середовище Microsoft Azure та система Neural Network Toolbox (Matlab) для рішення статистичних задач.</p> <p>Література: 10, 11.</p> <p>СРС: підготовка до залікового заняття.</p>

5. ПРАКТИЧНІ ЗАНЯТТЯ

№ з/п	Назва теми заняття та перелік основних питань (перелік дидактичного забезпечення, посилання на літературу та завдання на СРС)
	Практичні заняття не передбачені навчальним планом

6. КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Метою комп'ютерних занять є опанування і закріплення на практиці вмінь та досвіду, отриманих в процесі вивчення кредитного модулю. Матеріал комп'ютерних занять спрямований на закріплення вмінь і одержання досвіду використання методів комп'ютерного моделювання складних систем і обробки даних.

№ з/п	Назва комп'ютерного практикуму	Кількість ауд. годин
	Розділ 1. Математичне моделювання процесів неорганічної технології та водоочищення	
	<i>Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel та MathCad</i>	18
1	Вступ. Призначення курсу, його зв'язок з іншими дисциплінами. Видача індивідуального завдання. Вимоги до оформлення індивідуального завдання. Ревізія основних положень з роботи в середовищі Excel. ІТЕРАЦІЙНИЙ РОЗРАХУНОК ДВОСТУПЕНЕВОЇ НАКАТІОНІТОВОЇ УСТАНОВКИ. Завдання на СРС: Завершення роботи. Підготовка до наступного комп'ютерного заняття. Література: 1, 11.	2
2	РОЗРАХУНОК МОНОЕТАНОЛАМІНОВОГО ОЧИЩЕННЯ КОНВЕРТОВАНОГО ГАЗУ ВІД CO ₂ . КІНЕТИЧНИЙ РОЗРАХУНОК АБСОРБЕРУ. Завдання на СРС: Завершення роботи. Підготовка до наступного комп'ютерного заняття. Література: 1 – 5.	2
3	МАТЕРІАЛЬНИЙ, ТЕПЛОВИЙ І КОНСТРУКТИВНИЙ РОЗРАХУНОК РЕГЕНЕРАЦІЇ РОЗЧИНУ МОНОЕТАНОЛАМІНУ. СРС: підготовка вихідних даних для розрахунку регенерації відпрацьованого розчину поташу. Література: 1, 7, 12. Завдання на СРС: Завершення роботи. Підготовка до наступного комп'ютерного заняття.	2
4	РІШЕННЯ СИСТЕМИ РІВНЯНЬ ПРИ РОЗРАХУНКУ МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ СИНТЕЗУ АМІАКУ. Завдання на СРС: Завершення роботи. Підготовка до наступного комп'ютерного заняття та контрольної роботи. Література: 1 – 5.	2
5	РОЗРАХУНОК РІВНОВАГИ ОБОРОТНИХ РЕАКЦІЙ. КІНЕТИЧНИЙ РОЗРАХУНОК ТРУБЧАТОГО РЕАКТОРА	2

	<p>КОНВЕРСІЇ ПРИРОДНОГО ГАЗУ (<i>MathCad</i>).</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи. Підготовка до наступного комп'ютерного заняття.</p> <p>Література: 1 – 5, 9.</p>	
6	<p>РОЗРАХУНОК РІВНОВАГИ ПАРОВОПІТРЯНОЇ КОНВЕРСІЇ МЕТАНУ (<i>MathCad</i>).</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 1 – 5.</p>	2
7	<p>РІШЕННЯ СИСТЕМИ НЕЛІНЕЙНИХ РІВНЯНЬ У РОЗРАХУНКУ ПАРОВОПІТРЯНОЇ КОНВЕРСІЇ МЕТАНУ (<i>MathCad</i>).</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 1 – 5.</p>	2
8	<p>РІШЕННЯ СИСТЕМИ РІВНЯНЬ У РОЗРАХУНКУ ВУГЛЕКИСЛОТНОЇ РІВНОВАГИ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ (<i>MathCad</i>).</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 1, 11.</p>	2
9	<p>РОЗРАХУНКИ БАГАТОПОЛИЧНОГО РЕАКТОРУ ОКИСНЕННЯ ОКСИДУ (IV) СІРКИ (<i>MathCad</i>).</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 1, 8.</p>	2
	<p>Тема 1.2 Універсальна методика (УМ) розрахунку ХТС в середовищі мови Python</p>	6
10	<p>ОДНО ТА ДВОСТУПЕНЕВА УСТАНОВКА ЗВОРОТНОГО ОСМОСУ.</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 6, 7.</p>	2
11	<p>РІШЕННЯ СИСТЕМИ РІВНЯНЬ В АЛЬТЕРНАТИВНОМУ РОЗРАХУНКУ МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ СИНТЕЗУ АМІАКУ.</p> <p>Завдання на СРС: Завершення роботи.</p> <p>Література: 6, 7.</p>	2
12	<p>СКЛАДАННЯ СИСТЕМИ НЕЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ НА ОСНОВІ ІТЕРАЦІЙНИХ РОЗРАХУНКІВ.</p> <p>Завдання на СРС: Підготовка до контрольної роботи.</p>	2
13	<p>Модульна контрольна робота</p>	2
	<p>Розділ 2. Комп'ютерні системи обробки даних</p>	
	<p>Тема 2.1 Статистична обробка результатів експериментів на мові R</p>	3
14	<p>ОСНОВИ РОБОТИ В СЕРЕДОВИЩІ RSTUDIO. ОСНОВНІ СТАТИСТИЧНІ ФУНКЦІЇ МОВИ R</p> <p>Завдання на СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі stepic.org</p> <p>Література: 8.</p>	2
15	<p>ПРОГРАМУВАННЯ В R РАНІШЕ ВИКОНАНИХ ЗАВДАНЬ В EXCEL</p> <p>Завдання на СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі stepic.org</p> <p>Література: 8.</p>	1
	<p>Тема 2.2 Планування експерименту на мові R</p>	3

15	ПОВНИЙ ФАКТОРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ Виконати планування та обробку експеримента за посібником [9]. Завдання на СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі coursea.org Література: 9,10	1
16	ДРІБНИЙ ФАКТОРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ Виконати планування та обробку експеримента за посібником [9]. Завдання на СРС: виконання самостійних завдань на on-line ресурсі coursea.org Література: 9,10	2
	Тема 2.3 Використання нейронних мереж для обробки даних	2
17	ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ СКЛАДНИХ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ НА ОСНОВІ МЕТОДІВ ФОРМАЛЬНОЇ КІНЕТИКИ В СЕРЕДОВИЩІ НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ NEURAL NETWORK TOOLBOX (MATLAB) Завдання на СРС: виконати приклад з [11] та розробити власний механізм складного процесу та його обґрунтування. Література: 11	1
17	АПРОКСИМАЦІЯ СКЛАДНИХ БАГАТОФАКТОРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ В СЕРЕДОВИЩІ MICROSOFT AZURE Завдання на СРС: виконати приклад з [12] та дослідити складну залежність власних експериментальних даних. Література: 12	1
18	ЗАЛІКОВЕ ЗАНЯТТЯ	2

7. САМОСТІЙНА РОБОТА

№ з/п	Назва теми, що виноситься на самостійне опрацювання	Кількість годин СРС
1	Основний перелік видів самостійної роботи студентів надано в розділах 4, 6 робочої програми	26
2	Виконання розрахункової роботи	8
3	Підготовка до заліку	2
	Всього	36

8. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Метою індивідуальних завдань даного кредитного модулю є розробка власного алгоритму і програми багатоваріантного розрахунку матеріального, теплового балансів та (або) розрахунку обладнання в середовищі Python.

Тематика розрахункової роботи визначається темою курсового проекту з дисципліни спеціалізації 1 семестру. Вимоги до структури і змісту розрахункової роботи описані в методичних рекомендаціях на 7 сторінках.

9. КОНТРОЛЬНІ РОБОТИ

Одна модульна контрольна робота виконується в два етапи згідно розділу 3 і 6 і має за мету перевірку знань і вмінь студентів з відповідної теми. Перелік контрольних запитань додається до програми (Додаток Б). Оцінювання контрольної роботи, як і інших видів робіт, надано в положенні про РСО, що додається до робочої програми.

Контрольні питання формуються на підставі матеріалу Додатку Б.

10. РЕЙТИНГОВА СИСТЕМА ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Положення про рейтингову систему оцінювання знань студентів з кредитного модуля наведене у Додатку Б.

11. МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ

В основу програми даного кредитного модуля покладено авторські підходи, рішення і програмне забезпечення, що напрацьовані на кафедрі ТНР та ЗХТ впродовж кількох років. Лекційний матеріал доповнюється сумою знань і вмінь, які студенти отримали в 7 і 8 семестрах бакалаврської підготовки і продовжують отримувати в 1 семестрі паралельно з вивченням кредитного модуля. Саме активувати і розвивати асоціативну пам'ять студентів необхідно при постановці алгоритмічних задач шляхом безперервного звернення до відповідного технологічного матеріалу. Особливість комп'ютерного практикуму визначається програмним середовищем, в якому виконується робота. Глибина засвоєння матеріалу студентами напряму залежить від рівня підготовки (загальнонаукового, технологічного і інформаційного) викладачів, що проводять заняття. Завдання на ПК виконуються індивідуально кожним студентом в комп'ютерному класі 157-4 під час аудиторних занять, а також (при відсутності у студента ПК) при виконання СРС. В разі пропуску комп'ютерного заняття з метою запобігання списування файлів студент має отримати індивідуальне завдання з алгоритмічного втілення на ПК завдання з відповідної теми.

12. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

12.1. Базова

1. Навчальний посібник з дисциплін «Комп'ютерні технології у науковій та інженерній діяльності в технології неорганічних речовин» для студентів спеціальності 8.05130101 «Хімічні технології неорганічних речовин» хіміко-технологічного факультету. Укладачі: А.Л. Концевой, С.А. Концевой - НТУУ «КПІ», 2015. – 378 с. *Гриф надано Вченою радою НТУУ «КПІ» (Протокол №5 від 08 червня 2015 р.)*

2. ТОВАЖНЯНСЬКИЙ Л. Л. Технологія зв'язаного азоту: підручник / Л. Л. ТОВАЖНЯНСЬКИЙ, О. Я ЛОБОЙКО та ін. – Харків.: НТУ «ХПІ», 2007. - 536 с. – ISBN 978-966-384-070-3.

3. Лобойко О. Я. Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв (т.1. Зв'язаний азот): підручник / О. Я. Лобойко, Л. Л.Товажнянський, І. О. Слабун та ін. – Х.: НТУ «ХПІ», 2001. - 512 с. - ISBN 966-593-236-5.
4. Атрощенко В. И. Методы расчета по технологии связанного азота / В. И. Атрощенко, И. И. Гельперин, А. П. Засорин и др. – К.: Вища школа, 1978. – 312 с.
5. Позин М. Е. Расчеты по технологии неорганических веществ: учеб. пособ. для высш. учеб. завед. / под общ. ред. М.Е. Позина. - Л.: Химия, 1977. – 493 с.
6. Складання матеріальних балансів та розрахунки технологічних параметрів на їх основі. Режим доступу:
<https://drive.google.com/file/d/0B5pnts05mEIxY19Vc2p3dnJ6TEU/view?usp=sharing>
7. Бизли Дэвид. Python. Подробный справочник. - 4-е изд. СПб.: Символ-Плюс, 2010. - 858 с.
8. Анализ данных в R. Режим доступу: <https://stepik.org/course/129>
9. Комп'ютерний практикум з дисципліни «Методологія наукових досліджень» для студентів напряму 6.051301 «Хімічна технологія» професійного спрямування 8.05130101 «Хімічні технології неорганічних речовин» хіміко-технологічного факультету. Укладачі: А.Л. Концевой, І.М. Астрелін, С.А. Концевой - НТУУ «КПІ», 2011.– 120 с. Гриф надано Методичною радою НТУУ «КПІ» (Протокол № 9 від 24 травня .2012 р.) *Свідоцтво НМУ № Е 11/12-233*
10. Experimentation for Improvement. Режим доступу:
<https://www.coursera.org/learn/experimentation/home/welcome>
11. Обучение и использование нейронной сети при помощи Neural network toolbox в среде Matlab. Режим доступу: <https://www.youtube.com/watch?v=2afTCq1IWnc>
12. Machine Learning Studio. Режим доступу:
<https://www.youtube.com/watch?v=5yt84vrK5V4>

12.2. Допоміжна

13. Справочник сернокислотчика / Под ред. К.М. Малина. – М.: Химия, 1971. – 744 с.
14. Жаворонков Н. М. Справочник азотчика: В 2 ч. / под ред. Н. М. Жаворонкова. - М.: Химия, 1986. – Ч. 1. - 512 с.
15. Жаворонков Н. М. Справочник азотчика: В 2 ч. / Под ред. Н. М. Жаворонкова. - М.: Химия, 1987.- Ч.2. - 464 с.
16. Концевой А. Л. Алгоритмизация расчетов в производстве аммиака / А. Л. Концевой, Н. П. Гамалей – К.: НМК ВО, 1991. – 104 с.
17. Концевой А. Л. Алгоритмизация і програмування розрахунків у виробництві азотної кислоти / А. Л. Концевой , В. Г. Жук. – К.: НМК ВО, 1992. – 116 с.
18. Мартынова О.И. Водоподготовка. Расчеты на персональном компьютере [Текст] / О.И. Мартынова, А.В. Никитин, В.Ф. Очков. - М.: Энергоатомиздат. - 1990. - 216 с.
19. Алексеев Е.Р. SciLab: Решение инженерных и математических задач / Е.Р. Алексеев, О.В. Чеснокова, Е.А. Рудченко. - М. : ALT Linux ; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 260 с.
13. Уокенбах Джон. Excel 2003. Библия пользователя.: Пер. с англ. : Издательский дом «Вильямс», 2005. - 768 с.
14. Клименко Б.И., Microsoft Word: комфортная работа с помощью макросов. Самоучитель. / Б.И. Клименко, М.М. Розенберг. - Спб.: БХВ-Петербург, 2006. – 496 с.

13. Інформаційні ресурси

Практично вся вищевказана література розміщена у формі файлів на сервері кафедри ТНР та ЗХТ на диску srv\transit\ або srv\public та на сайті С.А. Концевого (потрібна авторизація) <https://sites.google.com/site/tnrkoi/>

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДЛЯ САМОПЕРЕВІРКИ ЗНАТЬ

Даний перелік націлений на перевірку знань студентів як в області математичного моделювання, так і в області відповідних технологій та наукових положень. Це пояснюється тим, що саме поєднання знань технології неорганічних речовин і вміння програмування визначає успішність засвоєння кредитного модуля.

1. Іонний обмін: реакції, статика, кінетика, динаміка. Особливості статичної і динамічної іонної обміну для опуклої та увігнутої ізотерм. Шляхи інтенсифікації іоннообмінних процесів. Конструкції фільтрів, область застосування, переваги і недоліки. Алгоритм розрахунку іоннообмінних процесів.
2. Методи отримання водню, область застосування, переваги і недоліки. Одно- і двоступеневі схеми конверсії природного газу, переваги і недоліки. Каталітичні системи. Конструкції реакторів. Профіль температури по висоті шахтного реактора. Інтегрування кінетичного рівняння.
3. Методи очищення газів від оксида карбону (IV), область застосування, переваги і недоліки. Конструкції абсорберів, область застосування, переваги і недоліки. Методи збільшення швидкості абсорбції. Кінетичний розрахунок насадкового абсорберу.
4. Фізико-хімічні основи синтезу і конденсації аміаку. Можливі конструкції реакторів. Організація теплообміну в реакторах. Графік залежності фактичного і рівноважного ступеня перетворення від температури і тиску у багатополичній колоні синтезу. Необхідність продування. Шляхи застосування продувального газу. Методи рішення систем нелінійних рівнянь при розрахунку матеріального балансу синтезу аміаку.
5. Визначення фактичного і рівноважного ступеня перетворення. Закон діючих мас. Константи рівноваги K_p , K_c , K_N . і зв'язок між ними. Принцип Ле Шательє, вплив температури, тиску, концентрації реагентів і інертних газів на зсув рівноваги реакції синтезу аміаку та окиснення SO_2 . Рішення нелінійних рівнянь в різних середовищах.
6. Можливі конструкції реакторів конверсії природного газу. Теплообмін в реакторах. Графік залежності фактичного і рівноважного ступеня перетворення від температури і тиску. Запобігання утворенню вуглецю. Кінетичний розрахунок трубчастої печі.
7. Фізико-хімічні основи каталітичного окиснення SO_2 у SO_3 : рівновага, каталізатори, швидкість. Можливі конструкції реакторів. Необхідність теплообміну в реакторі окиснення SO_2 у SO_3 та прийоми організації теплообміну. Графік залежності фактичного і рівноважного ступеня перетворення від температури і тиску. Лінія оптимальних температур (ЛОТ), принцип її побудови. Кінетичний розрахунок контактної апаратури.
8. Хімізм вуглекислотної рівноваги у водних розчинах. Вплив рН і температури на вміст форм вуглекислоти. Програмні засоби отримання графіку в різних середовищах.
9. Реакції газифікації рідкого палива, склад генераторного газу в залежності від його призначення і складу окислювачів. Способи компенсації ендотермічних ефектів при газифікації. Принцип термодинамічного і матеріального розрахунків процесів газифікації мазуту.
10. Реакції газифікації твердого палива, склад генераторного газу в залежності від його призначення і складу окислювачів. Способи компенсації ендотермічних ефектів при газифікації. Принцип термодинамічного і матеріального розрахунків процесів газифікації вугілля.
11. Методи рішення диференціальних рівнянь та їх систем. Відповідні програмні засоби у різних середовищах.
12. Рішення математичних задач (інтегрування, рішення нелінійних рівнянь та їх систем) у символічному вигляді та чисельно у середовищі MathCad.

13. Реалізація функцій у середовищі Python. Організація взаємодії функцій Python та застосування необхідних бібліотек.
14. Відмінності версій 2 та 3 мови Python.
15. Основи універсальної методики (УМ) розрахунку ХТС.
16. Реалізація розрахунку за УМ з використанням ітераційного циклу на мові Python.
17. Застосування УМ для одно та двоступеневої зворотно-осмотичної установки з використанням функцій мови Python.
18. Відмінності розрахунку змішувачів в двоступеневій зворотно-осмотичній установці.
19. Алгоритм розрахунку схеми синтезу аміаку згідно УМ.
20. Необхідність ітераційного розрахунку колони синтезу та конденсаторів в синтезі аміаку.
21. Середовище для застосування мови R.
22. Основні вбудовані та додаткові статистичні бібліотеки для R.
23. Відмінність статистичних розрахунків у середовищі Excel та R.
24. Основи планування експерименту в R.
25. Відмінність планування експерименту в Excel та R.
26. Основні задачі для застосування штучних нейронних мереж.
27. Послідовність використання системи Matlab для рішення задач за допомогою нейронних мереж.
28. Послідовність використання середовища Azure для рішення задач за допомогою Machine Learning Studio.

ПОЛОЖЕННЯ
про рейтингову систему оцінки успішності студентів
 з кредитного модуля: Комп'ютерні технології в процесах неорганічних
 виробництв та водоочищення
 для спеціальності: **161 Хімічні технології та інженерія**
спеціалізації Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення
 факультету: _____ хіміко-технологічного _____
 кафедри: _____ Технології неорганічних речовин та загальної хімічної технології _____

Розподіл навчального часу за видами занять і завдань дисципліни згідно з робочим навчальним планом:

СЕМЕСТР / КОД КРЕДИТНОГО МОДУЛЯ	Всього годин	Розподіл годин за видами занять						СРС	Кількість МКР	Вид інд. завд.	Семестрова атестація
		Лекції	Практичні заняття	Семінари	Лабораторні роботи	Комп'ютерний практикум	У тому числі на виконання індив.завд				
1/Ісв	90	18	-	-	36	-	36	8	1	РР	Диф. залік

Рейтинг студента з дисципліни складається з балів, що він отримує за:

- 1) Виконання та захист 16 тематичних комп'ютерних занять;
- 2) Самостійне проходження on-line курсів за 2-ма темами другого розділу;
- 3) Одну семестрову контрольну роботу;
- 4) Одну розрахункову роботу.

Система рейтингових (вагових) балів (r_к) та критерії оцінювання

1 Робота на комп'ютерних заняттях:

Ваговий бал – 4. Максимальна кількість балів на комп'ютерних заняттях дорівнює:
 4 балів × 16 = 64 балів.

Критерії оцінювання:

- 4 бали: безпомилкове виконання та оформлення завдання (розрахунку) *під час поточного заняття*;
- 3 бала: вірне в цілому рішення з незначними недоліками в оформленні, або похибками окремих елементів розрахунку, задача роботи під час наступного заняття;
- 2 бал: виконання вірного розрахунку після навідної допомоги викладача або проведення розрахунку зі значущими помилками, які підлягають виправленню; задача роботи під час наступного заняття;
- 0 балів: відсутність на занятті без поважних причин.

2 Самостійне проходження on-line курсів за 2-ма темами другого розділу

Кількість завдань цього виду: 2.

Ваговий бал – 8. Всього максимально – 2*8=16 балів.

Критерії оцінювання:

Відсоток проходження on-line курсу (від 60 до 100%). Розрахунок за окремим on-line курсом: відсоток*16/100.

3 Модульна контрольна робота (МКР)

Ваговий бал – 10.

Критерії оцінювання МКР:

- 10 балів: безпомилкова відповідь на всі питання при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних і фахових знань;
- 8 балів: недостатньо повна відповідь на всі питання або безпомилкова відповідь на 80% питань;
- 6 балів: безпомилкова відповідь на 50% питань або неповна відповідь на всі питання з двома – трьома досить суттєвими помилками;
- 4 бали: неповна відповідь на всі питання або безпомилкова відповідь не менше 30 % питань; наявність принципових помилок;
- 2 бали: неповна відповідь на частину питань; наявність принципових помилок;
- 0 балів: відсутність на занятті без поважних причин, списування (плагіат) під час контрольної або відмова від виконання контрольної роботи.

4 Розрахункова робота –семестрове індивідуальне завдання

Ваговий бал $r_{сз}$ – 10.

- 10 балів: повне розкриття змісту завдання при бездоганному оформленні до 10 грудня;
- 8 балів: повне розкриття змісту завдання без зауважень або з незначними зауваженнями при бездоганному оформленні до 20 грудня;
- 6 балів: достатньо повне розкриття змісту завдання при наявності зауважень не принципового характеру та оформленні до 25 грудня;
- 4 бали: відносно повне розкриття змісту завдання при наявності помилок і зауважень та оформлення до 29 грудня;
- 2 бали: недостатнє або дуже слабке розкриття змісту завдання з великою кількістю помилок і зауважень принципового характеру при оформленні після 30 грудня.

Штрафні бали (r_s) за :

- використання розрахункових інших студентів і подання їх за свої..-5 балів;
 - відсутність на занятті без поважних причин.....-2 бала;
 - запізнення (до 15 хв.) на заняття без поважних причин.....-0,5 бали;
 - запізнення (до 25 хв.) на заняття без поважних причин.....-1 бал.
- Сума штрафних балів (r_s) не повинна перевищувати, як правило 0,1 R_c (себто 10 балів).

Розрахунок шкали рейтингової оцінки з кредитного модуля (RD):

Сума вагових балів контрольних заходів (R_c) протягом семестру складає:

$$R_c = \sum_k r_k = 64 + 16 + 10 + 10 = 100.$$

Необхідними умовами допуску до заліку є зарахування всіх етапів контрольної роботи, всіх комп'ютерних занять, виконання розрахункової роботи, а також стартовий рейтинг (r_c) не менше 60 % від R_c , себто: $r_c = 0,6R_c = 0,6 \times 100 = 60$ балів. Таким чином, студенти, які набрали протягом семестру рейтинг вищий або рівний за $0,6 R_c$ ($R_c \geq 60$ балів), отримують залік.

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS та традиційних) його рейтингова оцінка **RD** переводиться згідно з таблицею:

RD = R_C	Оцінка
100...95	Відмінно
94...85	Дуже добре
84...75	Добре
74...65	Задовільно
64...60	Достатньо
$r_c < 60$	Не допущений

Якщо семестровий рейтинг студента дорівнює 60 балам і більше, він має право на отримання заліку «автоматом» (безпосередньо за результатами роботи в семестрі) згідно вище наведеної таблиці. Якщо рейтинг менше 60 або студент бажає підвищити оцінку, він виконує залікову контрольну роботу. Рейтингова оцінка з кредитного модуля у разі виконання залікової контрольної роботи визначається як сума балів із залікової контрольної роботи $r_{кр}$ та балів із семестрового індивідуального завдання (розрахункової роботи), що дорівнює $r_{сз} = 10$.

Розмір шкали оцінювання залікової контрольної роботи дорівнює ~~$r_{сз} = 10 - r_{кр} = 9$~~ .

Критерії залікової контрольної роботи:

- 90 - 86 балів: повна і безпомилкова відповідь (програмний файл) при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних і фахових знань, бездоганне обґрунтування цієї відповіді з залученням літературних джерел;
- 85 - 71 балів: достатньо повна і взагалі вірна відповідь з 80% розкриттям питання, відповідь ґрунтується тільки на матеріалах конспекту;
- 70 – 61 балів: взагалі вірна але недостатньо повна відповідь на запитання зі значними помилками та зауваженнями принципового характеру, з 50% розкриттям питання з двома – трьома досить суттєвими помилками;
- 60 - 46 балів: неповна відповідь з 30 % розкриттям питання; наявність принципових помилок;
- 45 - 21 балів: неповна відповідь з 20 % розкриттям питання; наявність великої кількості суттєвих і принципових помилок;
- 20 – 1 балів: наявність елементів правильної відповіді з великою кількістю помилок;
- 0 балів: відсутність на заліковому занятті без поважних причин або відмова від участі в ньому.

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS та традиційних) його рейтингова оцінка **RD** переводиться згідно з таблицею:

RD = $r_{сз} + r_{кр}$	Традиційна оцінка
100...95	Відмінно
94...85	Дуже добре
84...75	Добре
74...65	Задовільно
64...60	Достатньо
RD < 60 або списування (плагіат) під час залікової контрольної роботи	Не допущений

Склали:

доц. Концевой А.Л. _____ доц. Концевой С.А. _____

Ухвалено на засіданні кафедри ТНР та ЗХТ

Протокол №13 від 13 червня 2018 р.

в/о Завідувача кафедри _____ доц. Толстопалова Н.М.