



Комп'ютерні програмні пакети в технологіях неорганічних речовин

Робоча програма освітньої компоненти (Силабус)

Реквізити освітньої компоненти

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна інженерія та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Хімічні технології та інженерія</i>
Статус освітньої компоненти	<i>вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній семестр</i>
Обсяг освітньої компоненти	<i>8 кредитів/240 годин (лекційні заняття – 36 годин, лабораторні заняття – 36 годин, комп'ютерний практикум – 18 годин, СРС – 150 годин)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>екзамен /МКР, ДКР</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 години раз на тиждень (1 пара), лабораторні заняття 2 години раз на тиждень (1 пара), комп'ютерний практикум 2 години раз на два тижні (1 пара) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника освітньої компоненти / викладачів	Лектори: <i>к.т.н., доцент Шахновський Аркадій Маркусович, shakhnovsky.arcady@lll.kpi.ua</i> <i>к.т.н., ст.викл. Крimeць Григорій Володимирович, krimets@xtf.kpi.ua</i> Лабораторні заняття: <i>к.т.н., ст.викл. Крimeць Григорій Володимирович, krimets@xtf.kpi.ua</i> Комп'ютерний практикум: <i>к.т.н., доцент Шахновський Аркадій Маркусович, shakhnovsky.arcady@lll.kpi.ua</i>
Розміщення курсу	Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance). ОК "Комп'ютерні програмні пакети в технологіях неорганічних речовин" https://classroom.google.com/c/NzA5NDg5NTYxOTI5?cjc=pvsi6e7

Програма освітньої компоненти

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Розробка, впровадження та експлуатація енергозберігаючих, екологічно безпечних технологій у хімічному виробництві завжди пов'язані із проведенням низки досліджень, які вимагають, зокрема, розрахунку хіміко-технологічних процесів (ХТП) та систем (ХТС), їх аналізу в різних умовах функціонування. Складність вирішення таких задач обумовлена складною природою хіміко-технологічних процесів. Тому для розрахунку ХТП та ХТС було розроблено низку обчислювальних методів, що знайшли своє втілення у сучасному програмному забезпеченні.

Володіння сучасними комп'ютерними програмними пакетами для розрахунку хіміко-технологічних процесів та систем – важлива складова кваліфікації магістра з хімічних технологій та інженерії то його конкурентоспроможності на ринку праці.

Предмет освітньої компоненти: застосування комп'ютерних програмних пакетів в технологіях неорганічних речовин з метою зниження трудомісткості, а також підвищення якості процесів використання інформації.

Метою освітньої компоненти є формування здатності використовувати фундаментальні та прикладні знання і досвід в оперуванні основними поняттями, сучасними принципами та підходами системного аналізу, новітніми методами та комп'ютерними засобами аналізу при розробленні та дослідженні складних процесів та систем.

Після засвоєння навчальної освітньої компоненти здобувачі вищої освіти мають продемонструвати такі результати навчання:

Вивчення освітнього компоненту посилює наступні спеціальні (фахові) компетентності:

ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ФК4. Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії.

Вивчення освітнього компоненту посилює наступні програмні результати навчання:

ПРН6. Розробляти та реалізовувати проекти в сфері хімічних технологій та дотичні до неї міждисциплінарні проекти з урахуванням соціальних, економічних, екологічних та правових аспектів.

ПРН9. Знання сучасних методів дослідження, приладів та обладнань, програмного забезпечення в області хімічних технологій та інженерії.

2. Пререквізити та постреквізити освітньої компоненти (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Пререквізити: диплом рівня «бакалавр» за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія»: знання у хімічній технології та інженерії на бакалаврському рівні. Також матеріал освітньої компоненти базується на знаннях, що отримані у курсах «Сучасні методи кондиціонування та очищення води», «Фізико-хімія сучасних неорганічних матеріалів».

Постреквізити освітньої компоненти: матеріал освітньої компоненти може бути використаний для виконання магістерської дисертації, у подальшій професійній діяльності.

3. Зміст освітньої компоненти

Частина 1. Загальноінформаційна підготовка та комп'ютерна хімія

Тема 1.1 Основи роботи з науково-технічною інформацією

Поняття про науковий та навчальний інформаційний пошук. Основні види інформаційного пошуку. Інструменти отримання цільової інформації. Пошукова система Google Scholar. Навчальні платформи Coursera, EdX, Udemu.

Робота з програмним забезпеченням Microsoft Office. Оформлення текстових документів в середовищі MS Word. Обробка та візуалізація даних у середовищі MS Excel.

Основи створення наукової презентації. Перспективи використання штучного інтелекту та машинного навчання в хімічній інженерії.

Обробка та візуалізація даних в пакеті Origin. Спеціальні можливості пакету Origin.

Тема 1.2 Розрахунок термодинамічних та кінетичних закономірностей з використанням сучасних програмних продуктів

Основні поняття та визначення. Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша. Базові підходи в моделюванні молекул, кристалів, наночасток. Метод молекулярної механіки (ММ), напіємпіричні методи (AM1, PM3, ZINDO та інші), метод DFT, Monte-Carlo.

Тема 1.3 Програмні продукти для молекулярних розрахунків

Програмний комплекс HyperChem, NWChem. Особливості використання на різних типах комп'ютерів. Базові функції вводу виводу, вибору методу обчислень та візуалізації отриманих даних. Розрахунок основних термодинамічних характеристик молекул, електронних та інфрачервоних спектрів.

Тема 1.4 Побудова розрахункових спектрів

Використання пакету ChemBioOffice для прогнозування ЯМР спектрів. Візуалізація результатів розрахунків в програмі Vesta, Avogadro

Тема 1.5 Фахове використання штучного інтелекту та машинного навчання

Напрями використання штучного інтелекту та машинного навчання у технологіях неорганічних речовин. Переваги та виклики використання штучного інтелекту та машинного навчання.

Частина 2. Комп'ютерні програмні пакети для загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних.

Тема 2.1 Особливості використання сучасного програмного забезпечення для цілей для загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних.

Тема 2.2 Опрацювання результатів експериментальних досліджень у пакеті Origin.

Тема 2.3. Основні прийоми та етапи організації обчислювальних робіт в електронних таблицях.

Тема 2.4. Задачі, можливості та етапи візуалізації даних в електронних таблицях

Тема 2.5. Вирішення задач алгоритмізації та автоматизації загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних. Організація умовних розрахунків. Реалізація методів матричної алгебри та матеріальні баланси в MS Excel. Наближення функцій засобами MS Excel. Розв'язання рівнянь засобами MS Excel. Поняття про вирішення задач оптимізації засобами MS Excel.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології, та у дистанційному курсі [9]. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та лабораторних заняттях. Базове програмне забезпечення здобувачі вищої освіти можуть отримати у режимі хмарного доступу.

Базова:

1. Комп'ютерні програмні пакети в технологіях неорганічних речовин: комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних схем [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: А. М. Шахновський, О. О. Квітка, Г. В. Кринець. – Електронні текстові дані (1

файл: 5.45 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. – 208 с. URL: <https://ela.kpi.ua/items/34b64428-ba5b-4058-b5cd-d4bd24b95688>

Додаткова:

2. Комп'ютерні програмні пакети в технологіях неорганічних речовин: комп'ютерна хімія [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: Г. В. Кривець, С. О. Курій, А. М. Шахновський. – Електронні текстові дані (1 файл: 3,5 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 134 с. URL: <https://ela.kpi.ua/items/5c3fc19b-9eac-4e59-8f8f-835ae7b813b6>

3. Програмне забезпечення в хімічних технологіях: організація обчислювальних робіт [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: А. М. Шахновський, С. Г. Бондаренко, О. В. Сангінова. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,66 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 138 с. URL: <https://ela.kpi.ua/items/eb0a8c41-6921-4e2f-8f0e-c1d9d4c65b4c>

4. Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro 8: Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. / Д. В. Савченко ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 5,61 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 111 с. URL: <https://ela.kpi.ua/items/ae917a35-b889-4afe-8979-f432a9c74d03>

5. Математичні пакети та їх застосування. Навчальний посібник [Електронний ресурс] : навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: Л. М. Бугаєва, С. В. Плашихін. – Електронні текстові дані (1 файл: 2,24 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 86 с. URL: <https://ela.kpi.ua/items/c7f8bf26-123b-43e6-aab6-6dc1449a2fa6>

6. Szekely G. Sustainable process engineering. De Gruyter, 2021. 320 p. URL: https://www.researchgate.net/publication/349850835_Sustainable_Process_Engineering

Інформаційні ресурси

7. Introduction to Software for Chemical Engineers. URL: <https://www.pdfdrive.com/introduction-to-software-for-chemical-engineers-e39565591.html>

8. Chemistry software. URL: <https://library.bath.ac.uk/chemical-engineering/essential-reading>

9. Дистанційний курс Google G Suite for Education. Режим доступу: Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance); код курсу надається викладачем.

Навчальний контент

5. Методика опанування освітньої компоненти

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з освітньої компоненти проводиться паралельно з виконанням здобувачами вищої освіти лабораторних робіт та робіт комп'ютерного практикуму і розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій при змішаному навчанні застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom, тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед

наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Навчальні матеріали розміщені на платформі Sikorsky-distance [9].

№	Опис заняття
1	<p>Частина 1. Загальноінформаційна підготовка та комп'ютерна хімія</p> <p>Тема 1.1 Основи роботи з науково-технічною інформацією</p> <p><u>Основні питання:</u> Поняття про науковий та навчальний інформаційний пошук. Основні види інформаційного пошуку. Інструменти отримання цільової інформації. Пошукова система Google Scholar. Навчальні платформи Coursera, EdX, Udemu.</p>
2	<p>Тема 1.1. (продовження)</p> <p><u>Основні питання:</u> Робота з програмним забезпеченням Microsoft Office. Оформлення текстових документів в середовищі MS Word. Обробка та візуалізація даних у середовищі MS Excel.</p> <p>Основи створення наукової презентації. Перспективи використання штучного інтелекту та машинного навчання в хімічній інженерії.</p>
3	<p>Тема 1.1. (продовження)</p> <p><u>Основні питання:</u> Обробка та візуалізація даних в пакеті Origin. Спеціальні можливості пакету Origin.</p>
4	<p>Тема 1.2 Розрахунок термодинамічних та кінетичних закономірностей з використанням сучасних програмних продуктів</p> <p><u>Основні питання:</u> Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша. Базові підходи в моделюванні молекул, кристалів, наночасток. Метод молекулярної механіки (ММ), напіємпіричні методи (AM1, PM3,ZINDO та інші), метод DFT, Monte-Carlo.</p>
5	<p>Тема 1.3 Програмні продукти для молекулярних розрахунків</p> <p><u>Основні питання:</u> Програмний комплекс NucleChem, NWChem. Особливості використання на різних типах комп'ютерів. Базові функції вводу виводу, вибору методу обчислень та візуалізації отриманих даних.</p>
6	<p>Тема 1.3. (продовження)</p> <p><u>Основні питання:</u> Розрахунок основних термодинамічних характеристик молекул, електронних та інфрачервоних спектрів.</p>
7	<p>Тема 1.4 Побудова розрахункових спектрів</p> <p><u>Основні питання:</u> Використання пакету ChemBioOffice для прогнозування ЯМР спектрів.</p>
8	<p>Тема 1.4. (продовження)</p> <p><u>Основні питання:</u> Візуалізація результатів розрахунків в програмі Vesta. Візуалізація результатів розрахунків в програмі Avogadro</p>
9	<p>Тема 1.5 Фахове використання штучного інтелекту та машинного навчання</p> <p><u>Основні питання:</u> Напрями використання штучного інтелекту та машинного навчання у технологіях неорганічних речовин. Переваги та виклики використання штучного інтелекту та машинного навчання.</p>
10	<p>Частина 2. Комп'ютерні програмні пакети для загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних.</p> <p>Тема 2.1 Особливості фахового використання розрахункових пакетів.</p> <p><u>Основні питання:</u> Особливості використання сучасного програмного забезпечення для цілей для загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних.</p>
11	<p>Тема 2.2 Опрацювання результатів експериментальних досліджень у пакеті Origin.</p> <p><u>Основні питання:</u> Функції, інтерфейс пакету Origin. Вихідні дані та результати роботи.</p>
12	<p>Тема 2.3. Організація обчислень в електронних таблицях</p> <p><u>Основні питання:</u> Основні прийоми та етапи організації обчислювальних робіт в електронних таблицях.</p>
13	<p>Тема 2.4. Візуалізація даних</p>

	<u>Основні питання:</u> Задачі, можливості та етапи візуалізації даних в електронних таблицях
14	Тема 2.5. Вирішення задач алгоритмізації та автоматизації загальнотехнологічних розрахунків й опрацювання експериментальних даних. <u>Основні питання:</u> Організація умовних розрахунків.
15	Тема 2.5. (продовження) <u>Основні питання:</u> Реалізація методів матричної алгебри та матеріальні баланси в MS Excel.
16	Тема 2.5. (продовження) <u>Основні питання:</u> Наближення функцій засобами MS Excel.
17	Тема 2.5. (продовження) <u>Основні питання:</u> Розв'язання рівнянь засобами MS Excel.
18	Тема 2.5. (продовження) <u>Основні питання:</u> Поняття про вирішення задач оптимізації засобами MS Excel.

Комп'ютерний практикум

Метою комп'ютерного практикуму є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення освітньої компоненти. Матеріал комп'ютерного практикуму спрямований на опанування прийомів роботи у сучасних програмних середовищах розрахунку хіміко-технологічних процесів та систем.

Завдання та теоретичний матеріал до комп'ютерних практикумів розміщено у дистанційному курсі на платформі Сікорськи дистанс [9].

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1	Дослідження спеціальних засобів роботи електронних таблицях для потреб хімічних технологій	Відповідно до отриманого завдання дослідити спеціальні засоби роботи в електронних таблицях для потреб хімічних технологій.
3		1. Організація найпростіших балансових розрахунків у MS Excel.
5		2. Організація матричних розрахунків у MS Excel. Розрахунок матеріальних балансів ХТС у MS Excel із застосуванням інтегрального підходу на базі загальної матричної моделі ХТС
7		3. Дослідження методів візуалізації даних у MS Excel.
9		4. Дослідження спеціальних засобів організації розрахунків з використанням надбудов MS Excel
11		5. Дослідження базових прийомів роботи з програмою Origin.
13		6. Дослідження базових прийомів побудови 2D графіків в програмі Origin. Дослідження базових прийомів побудови 3D графіків в програмі Origin.
15		7. Дослідження базових прийомів налаштування графіків в програмі Origin.
17		8. Дослідження методів організації розрахунків в програмі Origin: апроксимація даних.
		9. Аналіз та обробка графічних даних в програмі Origin. Аналіз піків кривих в програмі Origin.

Лабораторні заняття

Метою лабораторних робіт одержання досвіду розв'язання практичних задач хімічної технології шляхом розрахунку хіміко-технологічних процесів та систем із застосуванням програмних середовищ.

Завдання та теоретичний матеріал до кожної лабораторної роботи розміщено у дистанційному курсі на платформі Сікорськи дистанс [9].

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1	Методи розрахунку молекули. Частина 1	Вивчення основ роботи програмного продукту Hyper Chem. Використання типових молекул для вивчення основного функціоналу пакету.
2	Методи розрахунку молекули. Частина 2	Вивчення основ роботи програмного продукту NWChem Використання інших типів молекул для вивчення основного функціоналу пакету.
3	Оформлення та візуалізація розрахунків. Частина 1	Вивчення основних функцій пакету ChemBioOffice
4	Оформлення та візуалізація розрахунків. Частина 2	Вивчення основних функцій та процедур у програмі Vesta, Avogadro
5	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 1)	Вивчення основного функціоналу програмного пакету Hyper Chem. Початок роботи. Основні функції та процедури
6	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 2)	Використання методів ММ для термодинамічного моделювання молекул кристалів, наночасток
7	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 3)	Використання напівемпіричних методів для поглибленого розрахунку наночасток та кристалів
8	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 4)	Вивчення розрахункових моделей при розрахунку в вакуумі та у щільному середовищі (Periodic BOX)
9	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 5)	Засвоєння основних прийомів роботи з пакетом NWChem. Умови логічних розрахунків
10	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 6)	Розрахунок молекул, кристалів, наноструктур з використанням різноманітних базисів 3G-6 імд.
11	Програмні продукти для молекулярних розрахунків (частина 7)	Оформлення звіту з розрахунків та його захист
12	Оформлення та візуалізація розрахунків (частина 1)	Обробка та візуалізація отриманих на попередніх заняттях даних. Оцінка правильності виконання розрахунків. Захист роботи
13	Оформлення та візуалізація розрахунків (частина 2)	Використання пакету ChemBioOffice для оформлення результатів розрахунку

14	Оформлення та візуалізація розрахунків (частина 3)	Аналіз результатів розрахунків
15	Оформлення та візуалізація розрахунків (частина 4)	Оформлення звіту з розрахунків
16	Оформлення та візуалізація розрахунків (частина 5)	Захист звіту з розрахунків
17	Захист домашньої контрольної роботи	
18	Виконання модульної контрольної роботи	

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота здобувача вищої освіти протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання (за вказівкою викладача) попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів з комп'ютерних практикумів, виконання розрахункової роботи, підготовку до захисту результатів практикуму, модульної контрольної роботи та домашньої контрольної роботи. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт – у таблиці:

Планування часу самостійної роботи:

Вид роботи	Кількість годин на підготовку
Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів моделей технологічних схем для проведення розрахунків під час комп'ютерного практикуму та лабораторних робіт, оформлення звітів	104
Виконання домашньої контрольної роботи	12
Підготовка до МКР (повторення матеріалу)	4
Підготовка до екзамену	30
Разом	150

Політика та контроль

7. Політика навчальної освітньої компоненти

Складові рейтингу студента з ОК:

- 1) виконання завдань на практичних заняттях;
- 2) виконання та захист лабораторного практикума.
- 3) написання МКР.
- 4) виконання ДКР.
- 5) відповідь на екзамені.

У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні роботи проводяться в навчальних аудиторіях хіміко-технологічного факультету КПІ ім. Ігоря Сікорського. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, лабораторні роботи – у лабораторіях. У дистанційному режимі всі заняття

проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Виконання лабораторного практикуму та їх захист є обов'язковою складовою допуску до екзамену.

Система вимог, які викладач ставить перед студентом:

- політика щодо академічної доброчесності: Кодекс честі Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» (<https://kpi.ua/files/honorcode.pdf>) встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з дисципліни;
- при використанні цифрових засобів зв'язку з викладачем (мобільний зв'язок, електронна пошта, переписка на форумах та у соцмережах тощо) необхідно дотримуватись загальноприйнятих етичних норм, зокрема бути ввічливим та обмежувати спілкування робочим часом викладача.

Правила захисту лабораторних робіт:

До захисту лабораторного практикуму допускаються студенти, які в повному об'ємі виконали завдання на лабораторних заняттях. Захист відбувається на останньому лабораторному занятті з теми у вигляді опитування. Після перевірки звіту з лабораторних робіт та відповідного захисту викладачем виставляється загальна оцінка і лабораторний практикум вважається захищеним.

Правила призначення заохочувальних балів:

- За модернізацію лабораторних робіт нараховується від 1 до 5 заохочувальних балів;
- За активну роботу на лекції нараховується до 0,5 заохочувальних балів (але не більше ніж 6 балів за семестр (10% від рейтингу в семестрі)).
- Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету. <https://kpi.ua/files/honorcode.pdf>, що встановлює загальні моральні принципи, правила етичної поведінки осіб та передбачає політику академічної доброчесності для осіб, що працюють і навчаються в університеті, якими вони мають керуватись у своїй діяльності, в тому числі при вивченні та складанні контрольних заходів з ОК

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: доповідь на практичних заняттях, захист лабораторного практикуму та оформлення звіту (позитивна оцінка, яка має бути не менше 60% від зазначеного в PCO), виконання ДКР, написання МКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: екзамен.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

Рейтинг студента з освітнього компонента розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 60 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

1. Лабораторні роботи:

«відмінно», якісне творче виконання поставленого завдання на лабораторних роботах, вільне володіння матеріалом – 19-20 балів;

«добре», глибоке розкриття одного з питань дискусії – 15-18,9 балів;

«задовільно», активна участь на практичному занятті – 12-14,9 балів;

«незадовільно» – 0 балів;

2. Робота на практичних заняттях:

«відмінно», якісне творче виконання поставленого завдання на лабораторних роботах, вільне володіння матеріалом, бездоганне виконання та оформлення завдань – 17-18 балів;

«добре», глибоке розкриття питань, якісне виконання та оформлення завдань – 13-16,9 балів;

«задовільно», активна участь на практичному занятті, якісне виконання завдань, несуттєві похибки у оформленні звітів – 10-12,9 балів;

«незадовільно» – 0 балів;

3. Виконання ДКР. Ваговий бал – 12 балів:

«відмінно», 11,5-12 балів: детальне обґрунтування стадій роботи; демонстрація фундаментальних знань, творчого підходу для вирішення поставленого завдання; бездоганне оформлення ДКР;

«добре», 9-11,4 балів: використання елементів продуктивного (творчого) підходу для вирішення поставленого завдання; якісне оформлення ДКР;

«задовільно», 7-8,9 балів: несуттєві похибки у виконаних завданнях, оформлення ДКР з порушенням форматування;

«незадовільно» – 0 балів, завдання виконано невірно, оформлення ДКР з суттєвими порушенням та без посилання на використану літературу.

ДКР має бути подана у встановлений термін.

4. Модульна контрольна робота:

«відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 9-10 балів;

«добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 7-8,9 балів;

«задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6-6,9 балів;

«незадовільно», незадовільна відповідь (не відповідає вимогам) – 0 балів.

Робота проводиться у вигляді тесту в Google-формах в дистанційному курсі Сікорський-дистанс (80 тестових питань по 0,25 балів кожне, ліміт часу – 90 хвилин).

Критерії екзаменаційного оцінювання:

В екзаменаційному білеті передбачено теоретичні запитання та практичні завдання. Система оцінювання питань:

«відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 38–40 балів;

«добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності) – 30 – 37,9 балів;

«задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 24 – 29,9 балів;

«незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.

Максимальна сума балів, яку студент може набрати впродовж семестру, складає 60 балів: $RC = r_{лб} + r_{пр} + r_{дкр} + r_{мкр} = 12 + 18 + 12 + 10 = 60$ балів.

Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт. На першому календарному контролі (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 24 = 12$ балів. На другому календарному контролі (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 54 = 27$ балів і зарахована домашня контрольна робота.

Відповідно до Положення про організацію навчального процесу в КПІ ім. Ігоря Сікорського, необхідними умовами допуску до екзамену виконання і захист всіх практичних завдань та завдань лабораторного практикуму, домашньої контрольної роботи на позитивну оцінку, яка має бути не менше 60% від зазначеного в РСО, тобто 18 балів, а також стартовий рейтинг (r_c) не менше 60% від RC , тобто $r_c = 0,6 RC = 0,6 \times 60 = 36$ балів.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Для більш ґрунтовного опанування програмного матеріалу освітньої компоненти здобувач вищої освіти одержує індивідуальне завдання на домашню контрольну роботу за темою: Комп'ютерні розрахунки. Ціллю індивідуального завдання є стимулювання здобувачів вищої освіти до самостійного осмислення теоретичного і фактичного матеріалу, самостійного виконання матеріальних, теплових і конструктивних розрахунків, вдосконалення вміння пошуку та аналізу інформації з програмного матеріалу (в т. ч. з використанням мережі Internet) і творчого, продуктивного, обґрунтованого рішення індивідуального завдання, що максимально наближена до реальних науково-технологічних проблем. *Вимоги до оформлення домашньої контрольної роботи, перелік запитань на екзамен наведені у дистанційному курсі [9].*

Зарахування окремих результатів, отриманих в межах неформальної освіти, здійснюється згідно Положення про визнання в КПІ ім. Ігоря Сікорського результатів навчання, набутих у неформальній/інформальній освіті <https://osvita.kpi.ua/node/179>

Екзаменаційні питання та завдання

1. *Поняття про науковий та навчальний інформаційний пошук.*
2. *Основні види інформаційного пошуку.*
3. *Інструменти отримання цільової інформації.*
4. *Пошукова система Google Scholar.*
5. *Навчальні платформи Coursera, EdX, Udemy.*
6. *Особливості оформлення текстових документів в середовищі MS Word.*
7. *Особливості обробки та візуалізації даних у середовищі MS Excel.*
8. *Особливості створення наукової презентації.*
9. *Перспективи використання штучного інтелекту та машинного навчання в хімічній інженерії.*
10. *Особливості обробки та візуалізації даних в пакеті Origin. Спеціальні можливості пакету Origin.*
11. *Розрахунок термодинамічних характеристик органічних складових з використанням метода Караша.*
12. *Базові підходи в моделюванні молекул, кристалів, наночасток.*
13. *Метод молекулярної механіки (ММ), напіємпіричні методи (AM1, PM3, ZINDO та інші), метод DFT, Monte-Carlo.*

14. Програмний комплекс HyperChem, NWChem. Особливості використання на різних типах комп'ютерів. Базові функції вводу виводу, вибору методу обчислень та візуалізації отриманих даних.
15. Розрахунок основних термодинамічних характеристик молекул, електронних та інфрачервоних спектрів у HyperChem, NWChem.
16. Використання пакету ChemBioOffice для прогнозування ЯМР спектрів.
17. Візуалізація результатів розрахунків в програмі Vesta. Візуалізація результатів розрахунків в програмі Avogadro
18. Напрями використання штучного інтелекту та машинного навчання у технологіях неорганічних речовин. Переваги та виклики використання штучного інтелекту та машинного навчання.
19. Організація умовних розрахунків у середовищі MS Excel.
20. Реалізація методів матричної алгебри та матеріальні баланси в MS Excel.
21. Наближення функцій засобами MS Excel.
22. Розв'язання рівнянь засобами MS Excel.
23. Поняття про вирішення задач оптимізації засобами MS Excel.

Типові завдання:

Згідно з отриманим індивідуальним завданням, виконати:

- розрахунок матеріальних (теплових) балансів ХТС у MS Excel;
- прикладний розрахунок в матричному вигляді у MS Excel;
- розрахунок матеріальних (теплових) балансів ХТС у MS Excel із застосуванням інтегрального підходу на базі загальної матричної моделі ХТС;
- побудову графіків (або інших типів діаграм) у MS Excel;
- у MS Excel;
- розв'язання рівняння у MS Excel;
- наближення табличних даних у MS Excel;
- розв'язання задачі оптимізації у MS Excel;
- побудову графіків 2D графіків в програмі Origin;
- побудову графіків 3D графіків в програмі Origin;
- апроксимацію табличних даних в програмі Origin;
- аналіз (обробку) піків кривих (спектрограм) в програмі Origin.

Силабус освітньої компоненти:

Складено НПП кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології:

к.т.н., доц. Шахновський А.М.

к.т.н., ст.викл. Кринець Г.В.

Ухвалено кафедрою ТНРВ та ЗХТ (протокол № 29 від 28.06.2023р.)

Погоджено методичною комісією факультету (протокол № 9 від 25.05.2023 р.)