



Чисельні методи в хімії і хімічній технології

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Для всіх освітніх програм спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс, осінній семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 години на тиждень (1 пара), комп'ютерний практикум 2 години на тиждень (1 пара) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектори: <i>к.т.н., доцент Бондаренко Сергій Григорович, bondarenko.serhii@lll.kpi.ua</i> <i>к.т.н., доцент Сангінова Ольга Вікторівна, sanginova.olga@lll.kpi.ua,</i> <i>телеграм: @OlhaSan</i> Комп'ютерні практикуми: <i>к.т.н., доцент Бондаренко Сергій Григорович, bondarenko.serhii@lll.kpi.ua</i> <i>к.т.н., доцент Сангінова Ольга Вікторівна, sanginova.olga@lll.kpi.ua,</i> <i>к.т.н., доцент Шахновський Аркадій Маркусович,</i> <i>shakhnovsky.arcady@lll.kpi.ua</i>
Розміщення курсу	<i>Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance); доступ за запрошенням викладача</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Чисельні методи широко використовуються для вирішення завдань хімічної технології і є основним інструментом вирішення сучасних прикладних задач. Наближений характер результатів чисельних методів не є принциповою перешкодою до їх використання, оскільки у більшості випадків результат можна отримати із заданою точністю. Вміння обробляти результати спостережень, здатність оцінювати параметри статистичних рядів розподілу, отриманих в результаті експериментальних досліджень, є ключовим для бакалавра з хімічних технологій та інженерії.

Предмет дисципліни: чисельні методи, що застосовуються для розв'язання типових інженерних задач хімії та хімічної технології, та комп'ютерні засоби їх реалізації.

Метою дисципліни є формування у студентів здатностей:

- використовувати чисельні методи для рішення типових завдань у хімічних технологіях та інженерії;

- використовувати професійно профільовані знання в галузі математики (математичної статистики) для статистичної обробки експериментальних даних і математичного моделювання хімічних і хіміко-технологічних процесів;
- використовувати інформаційні технології для рішення експериментальних і практичних завдань у хімічних технологіях та інженерії.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

ЗНАННЯ:

- типові чисельні методи для розв'язування різних задач хімії і хімічної технології;
- статистичні методи оброблення та аналізування результатів експериментальних досліджень в галузі хімічної технології;
- сучасні комп'ютерні технології для застосування числових методів (обчислювальних схем) при вирішенні інженерних задач хімічної технології на комп'ютері.

УМІННЯ:

- розв'язувати задачі хімії та хімічної технології за допомогою типових чисельних методів;
- обробляти та аналізувати результати експериментальних досліджень за допомогою сучасних комп'ютерних технологій;
- оцінювати похибки при виконанні інженерних розрахунків;
- використовувати сучасні пакети прикладних програм для розв'язання типових задач хімії і хімічної технології;

ДОСВІД:

- використання числових методів для розв'язання типових задач хімії і хімічної технології;
- застосування стандартного ПЗ (MS Excel/ VBA/ Mathcad) для виконання інженерних розрахунків.

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

Зазначається перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Вища математика	Властивості неперервних функцій. Системи алгебраїчних рівнянь. Звичайні диференціальні рівняння та їх системи. Матриці та матричні перетворення.
Інформаційні технології	Принципи обробки інформації в математичних пакетах та програмних пакетах загального призначення – MS Excel. Основи алгоритмізації. Робота з сучасними програмними продуктами: VBA/ Mathcad

Дисципліни, які базуються на результатах навчання: дисципліни циклу професійної підготовки, в рамках яких передбачена обробка та аналіз результатів експериментальних досліджень, оцінка похибок при виконанні інженерних розрахунків та застосування чисельних методів для вирішення практичних занять.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Основні елементи теорії похибок.

Предмет вивчення і задачі дисципліни. Джерела виникнення похибок Абсолютна та відносна похибка. Правила округлення чисел. Десятковий запис наближеного числа. Значущі, вірні і сумнівні цифри. числа. Зв'язок між числом вірних цифр та похибкою наближеного числа. Похибки при обчисленні функції декількох змінних (суми та різниці, добутку та частки степеня). Визначення похибок для при виконанні розрахунків за різними формулами.

Тема 2. Чисельні методи розв'язку нелінійних рівнянь.

Постановка задачі. Графічні та аналітичні методи відокремлення коренів. Методи уточнення значень коренів з необхідною точністю (ітерацій, дихотомії - половинного поділу). Порівняння методів. Приклади алгоритмів. Методи уточнення значень коренів з необхідною точністю: хорд, Ньютона, комбінований. Графічна інтерпретація методів. Порівняння методів. Приклади алгоритмів.

Тема 3. Методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Постановка задачі. Огляд методів розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Метод Гауса. Розв'язання систем лінійних рівнянь методом простих ітерацій. Приклади алгоритмів. Схема єдиного ділення за методом Гауса.

Тема 4. Методи наближення функцій.

Методи інтерполяції функцій. Постановка задачі інтерполяції. Інтерполяційна формула Лагранжа. Оцінювання похибки формули Лагранжа. Алгоритм розрахунку за методом Лагранжа. Приклади розрахунків. Зворотна інтерполяція за допомогою інтерполяційної формули Лагранжа. Приклади. Приклади технологічних розрахунків з використанням формули Лагранжа. Поняття скінченних різниць. Зв'язок скінченних різниць із похідними. Інтерполяційні формули Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції (інтерполювання "вперед" та інтерполювання "назад"). Оцінювання похибки для формул Ньютона. Приклади алгоритмів та розрахунків. Зворотна інтерполяція за допомогою інтерполяційних формул Ньютона. Приклади. Приклади технологічних розрахунків з використанням формул Ньютона.

Задача апроксимації. Постановка задачі. Метод найменших квадратів. Лінійна апроксимація за методом найменших квадратів. Квадратична апроксимація за методом найменших квадратів. Приклади розрахунків. Приклади технологічних розрахунків з використанням метода найменших квадратів. Апроксимація за методом найменших квадратів з використанням емпіричних залежностей (показникової, степеневої та інших функцій), метод вирівнювання. Вибір виду емпіричної формули. Визначення параметрів емпіричної формули. Приклади алгоритмів. Приклади технологічних розрахунків з використанням метода апроксимації для показникових, степеневих, логарифмічних та інших функцій.

Тема 5. Чисельне диференціювання та інтегрування.

Постановка задачі диференціювання. Використання формул Ньютона для чисельного диференціювання. Знаходження значень похідних у вузлових точках. Приклади розрахунків.

Постановка задачі інтегрування. Метод трапецій. Оцінка похибки метода. Метод парабол (Сімпсона). Оцінка похибки інтегрування за методом Сімпсона. Приклади алгоритмів. Приклади розрахунків.

Тема 6. Числові методи розв'язування звичайних диференціальних рівнянь.

Постановка задачі розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Наближений розв'язок диференціальних рівнянь. Метод Ейлера та його модифікації. Метод Рунге-Кутта. Порівняльна оцінка похибок методів. Розв'язок систем звичайних диференціальних рівнянь методом Ейлера та Рунге-Кутта. Приклади алгоритмів. Модифікації методу Ейлера. Приклади розв'язання диференціальних рівнянь з хіміко-технологічної практики.

Тема 7. Методи систематизації статистичного матеріалу.

Основні поняття теорії ймовірностей. Випадкові величини. Закон розподілу випадкової величини. Функція розподілу. Числові характеристики випадкової величини (математичне очікування, дисперсія, середнє квадратичне відхилення).

Задачі математичної статистики. Основні поняття математичної статистики. Генеральна сукупність та вибірка. Проста статистична сукупність. Статистичний ряд. Емпірична функція розподілення. Інтервальне розподілення. Гістограма. Числові характеристики статистичного розподілення. Вибіркове середнє та вибіркова дисперсія (розрахунок, інтерпретація). Оцінки характеристик випадкових величин та їх властивості. Точкові та інтервальні оцінки. Рівень значимості. Приклади для хіміко-технологічних величин.

Тема 8. Елементи теорії кореляції.

Задачі кореляційного аналізу. Оцінювання тісноти зв'язку. Коефіцієнт кореляції. Кореляційна залежність. Лінійна кореляція. Поле кореляції. Поняття про регресію. Застосування методу найменших квадратів для розрахунку параметрів рівняння регресії. Випадок лінійної кореляції за незгрупованими даними. Випадок лінійної кореляції за згрупованими даними. Кореляційна таблиця. Кореляційна таблиця. Нелінійна кореляційна залежність. Кореляційне відношення. Приклади розрахунку з хіміко-технологічної практики.

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. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова:

- 1. Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.Я. Обчислювальна математика та програмування. Обчислювальна математика в хімії і хімічній технології: Підручник. – К.: ІВЦ "Видавництво Політехніка", ТОВ "Фірма "Періодика"", 2004. – 220 с.*
- 2. Обчислювальна математика та програмування: методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з кредитного модуля «Чисельні методи» дисципліни «Обчислювальна математика та програмування» для студентів хіміко-технологічного факультету напряму 6.051301 «Хімічна технологія»/ Автори: Бондаренко С.Г., Сангінова О.В. Брановицька С.В. – К.: НТУУ "КПІ", 2012.–112 с.*
- 3. Обчислювальна математика та програмування: методичні вказівки і завдання до виконання розрахунково-графічної роботи та самостійної роботи для студентів*

напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія» / Автори: С.Г. Бондаренко, С.В. Брановицька, О.В. Сангінова – К.: НТУУ "КПІ", 2013.– 67с. (Рекомендовано Вченою радою ХТФ, Протокол №4 від 27 травня 2013 р.)

4. Обчислювальна математика та програмування: методичні вказівки і завдання до практичних занять та самостійної роботи студентів з кредитного модуля Чисельні методи дисципліни Обчислювальна математика та програмування для студентів хіміко-технологічного факультету напряму підготовки 6.051301 «Хімічна технологія». / Автори: С.Г. Бондаренко, С.В. Брановицька, О. В. Сангінова – К.: НТУУ "КПІ", 2014.– 77 с. (Рекомендовано Вченою радою ХТФ, протокол № 5 від 26 травня 2014 р.)

Додаткова

5. Фельдман Л.П., Петренко А.І., Дмитрієва О.А. Чисельні методи в інформатиці. К.: Видавн. гр. ВНУ, 2006. – 480 с.
6. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М.: Наука, 1970. – 664 с.
7. Гмурман В.Е. Теория вероятности и математическая статистика. – М.: ВШ, 1999. – 215 с.
8. Математическая обработка экспериментальных данных. Пособие для студентов химико-технологического факультета. / С.В.Брановицька, С.Г.Бондаренко, А.А.Квитка, Р.Б.Медведев, А.И.Ткачук. – К.: НТУУ "КПИ", 1997. – 76 с.

Інформаційні ресурси

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 jsciksx.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами робіт комп'ютерного практикуму та 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, які розміщені на платформі Sikorsky-distance [9]. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Опис заняття
1	Тема 1 – Основні елементи теорії похибок: Предмет вивчення і задачі дисципліни. Джерела виникнення похибок Абсолютна та відносна похибка. Правила округлення чисел. Десятковий запис наближеного числа. Значущі, вірні і сумнівні цифри. числа. Зв'язок між числом вірних цифр та похибкою наближеного числа.
2	Продовження теми 1: Похибки при обчисленні функції декількох змінних (суми та різниці, добутку та частки степеня). Визначення похибок для при виконанні розрахунків за різними формулами.
3	Тема 2 – Чисельні методи розв'язку нелінійних рівнянь: Постановка задачі. Графічні та аналітичні методи відокремлення коренів. Методи уточнення значень коренів з

	<i>необхідною точністю (ітерацій, дихотомії - половинного поділу). Порівняння методів. Приклади алгоритмів.</i>
4	<i>Продовження теми 2: Методи уточнення значень коренів з необхідною точністю: хорд, Ньютона, комбінований. Графічна інтерпретація методів. Порівняння методів. Приклади алгоритмів.</i>
5	<i>Тема 3 – Чисельні методи розв'язку систем лінійних алгебраїчних рівнянь: Постановка задачі. Огляд методів розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Прямий метод Гауса (схема єдиного ділення). Розв'язання систем лінійних рівнянь методом ітерацій та ітераційним методом Гауса-Зейделя. Приклади алгоритмів.</i>
6	<i>Тема 4 – Чисельні методи наближення функцій: Методи інтерполяції функцій. Постановка задачі інтерполяції. Інтерполяційна формула Лагранжа. Оцінювання похибки формули Лагранжа. Алгоритм розрахунку за методом Лагранжа. Приклади розрахунків. Зворотна інтерполяція за допомогою інтерполяційної формули Лагранжа. Приклади.</i>
7	<i>Продовження теми 4: Поняття скінченних різниць. Зв'язок скінченних різниць із похідними. Інтерполяційні формули Ньютона для рівновіддалених вузлів інтерполяції (інтерполювання "вперед" та інтерполювання "назад"). Оцінювання похибки для формул Ньютона. Приклади алгоритмів та розрахунків.</i>
8	<i>Продовження теми 4: Зворотна інтерполяція за допомогою інтерполяційних формул Ньютона. Приклади.</i>
9	<i>Продовження теми 4: Задача апроксимації. Постановка задачі. Метод найменших квадратів. Лінійна апроксимація за методом найменших квадратів. Квадратична апроксимація за методом найменших квадратів. Приклади розрахунків. Приклади алгоритмів.</i>
10	<i>Продовження теми 4: Апроксимація за методом найменших квадратів з використанням емпіричних залежностей (показникової, степеневої та інших функцій), метод вирівнювання. Вибір виду емпіричної формули. Визначення параметрів емпіричної формули. Приклади алгоритмів. Приклади розрахунків.</i>
11	<i>Тема 5 – Чисельне диференціювання та інтегрування: Постановка задачі чисельного диференціювання. Використання формул Ньютона для чисельного диференціювання. Знаходження значень похідних у вузлових точках. Приклади розрахунків.</i>
12	<i>Продовження теми 5: Постановка задачі чисельного інтегрування. Метод трапецій. Оцінка похибки метода. Метод парабол (Сімпсона). Оцінка похибки інтегрування за методом Сімпсона. Приклади алгоритмів. Приклади розрахунків.</i>
13	<i>Тема 6 – Числові методи розв'язування звичайних диференціальних рівнянь та їх систем: Постановка задачі розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Наближений розв'язок диференціальних рівнянь. Метод Ейлера та його модифікації. Приклади алгоритмів. Приклади розрахунків.</i>
14	<i>Продовження теми 6: Метод Рунге-Кутта. Розв'язок систем звичайних диференціальних рівнянь методами Ейлера та Рунге-Кутта. Приклади алгоритмів. Приклади розрахунків. Порівняльна оцінка похибок методів.</i>
15	<i>Тема 7 – Методи систематизації статистичного матеріалу: Основні поняття теорії ймовірностей. Випадкові величини. Закон розподілу випадкової величини. Функція розподілу. Числові характеристики випадкової величини (математичне очікування, дисперсія, середнє квадратичне відхилення). Задачі математичної статистики. Основні поняття математичної статистики. Генеральна сукупність та вибірка. Проста статистична сукупність. Статистичний ряд.</i>

	<i>Емпірична функція розподілення. Інтервальне розподілення. Гістограма. Приклади для хіміко-технологічних величин.</i>
16	<i>Продовження теми 7 Числові характеристики статистичного розподілення. Вибіркове середнє та вибіркoва дисперсія (розрахунок, інтерпретація). Оцінки характеристик випадкових величин та їх властивості. Точкові та інтервальні оцінки. Рівень значимості. Приклади для хіміко-технологічних величин.</i>
17	<i>Тема 8 – Елементи теорії кореляції: Задачі кореляційного аналізу. Оцінювання тісноти зв'язку. Коефіцієнт кореляції. Кореляційна залежність. Лінійна кореляція. Поле кореляції. Поняття про регресію. Застосування методу найменших квадратів для розрахунку параметрів рівняння регресії. Випадок лінійної кореляції за незгрупованими даними.</i>
18	<i>Продовження теми 8: Випадок лінійної кореляції за згрупованими даними. Кореляційна таблиця. Приклади розрахунку з хіміко-технологічної практики.</i>

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 навчальної дисципліни «Чисельні методи в хімії і хімічній технології». Матеріал комп'ютерного практикуму спрямований на одержання досвіду розв'язання практичних задач хімічної технології шляхом використання чисельних методів та методів статистичної обробки даних, в тому числі і з застосуванням програмних середовищ (MS Excel, VBA).

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1	<i>Дії з наближеними числами. Визначення похибок</i>	<i>Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати дії над наближеними числами. Розрахунки проводити у MS Excel. При визначенні похибок наближеної величини, отриманої в результаті обчислення за заданою формулою, розробити програму, яка реалізує розрахунок абсолютної і відносної похибок. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.</i>
2		<i>Захист роботи</i>
3	<i>Наближений розв'язок нелінійних рівнянь</i>	<i>Відповідно до отриманого індивідуального завдання відокремити корені нелінійного алгебраїчного рівняння та уточнити їх методами проб та ітерацій. Скласти програми для реалізації даних методів з використанням ітераційних циклів і підпрограм. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.</i>
4		<i>Захист роботи</i>
5	<i>Розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь</i>	<i>Відповідно до отриманого індивідуального завдання розв'язати систему лінійних алгебраїчних рівнянь з використанням методу ітерацій та прямого методу Гауса (схеми єдиного ділення). Скласти програму, що реалізує метод ітерацій. Отримати значення невідомих системи з заданою точністю. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.</i>
6		<i>Захист роботи</i>

7	Інтерполяція функцій	Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати інтерполяцію й зворотну інтерполяцію таблично заданої функції з використанням інтерполяційної формули Лагранжа. Скласти програму для обчислення значень функції. Адаптувати програму для вирішення задачі зворотної інтерполяції. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
8		Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати інтерполяцію таблично заданої функції з використанням відповідної інтерполяційної формули Ньютона. Скласти програму для обчислення значень функції. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
9		Захист роботи
10	Чисельне інтегрування	Відповідно до отриманого індивідуального завдання визначити значення визначеного інтеграла за формулами трапецій та Сімпсона. Скласти програму, що реалізує обчислення визначеного інтеграла з заданою точністю. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
11		Захист роботи
12	Чисельний розв'язок звичайних диференціальних рівнянь	Відповідно до отриманого індивідуального завдання отримати чисельне рішення диференційного рівняння. Скласти програму, що реалізує алгоритм методу Ейлера. Розв'язати диференціальне рівняння методом Рунге-Кутта. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
13		Захист роботи
14	Захист розрахункової роботи	
15	Статистична обробка експериментальних даних	Відповідно до отриманого індивідуального завдання розрахувати числові характеристики статистичного розподілу та побудувати гістограму частот. Продемонструвати розрахунки викладачу.
16		Захист роботи
17	Написання модульної контрольної роботи	
18	Підсумкове заняття	До відома студентів доводиться кількість балів, яку вони набрали протягом семестру. Студенти, які були не допущеними до семестрової атестації з кредитного модуля, мають усунути причини, що призвели до цього.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів з комп'ютерних практикумів, виконання розрахункової роботи, підготовка

до захисту практичних завдань, модульної контрольної роботи та розрахункової роботи. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів з комп'ютерних практикумів	2 – 3 години на тиждень
Виконання розрахункової роботи	10 годин
Підготовка до захисту розрахункової роботи	4 години
Підготовка до МКР (повторення матеріалу)	4 години

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та комп'ютерні практикуми проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, комп'ютерні практикуми – у комп'ютерних класах. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та комп'ютерних практикумів є обов'язковим.

На початку кожної лекції лектор може проводити опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms, menti.com, Kahoot тощо). Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою, підвищення зацікавленості та залучення слухачів до розв'язання прикладів.

Правила захисту комп'ютерних практикумів та розрахункової роботи:

1. До захисту допускаються студенти, які правильно виконали розрахунки (при неправильно виконаних розрахунках їх слід усунути).
2. Захист відбувається за графіком, зазначеним у п.5 за індивідуальними завданнями.
3. Після перевірки завдання викладачем на захист виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.
4. Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Несвоєчасне виконання комп'ютерного практикуму без поважної причини штрафуються штрафуються 1 балом;
2. Несвоєчасний захист роботи без поважної причини штрафуються 1 балом;
3. За кожний тиждень запізнення з поданням розрахункової роботи на перевірку нараховується 1 штрафний бал (але не більше 5 балів).
4. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
5. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
6. За активну роботу на лекції нараховується до 0,5 заохочувальних балів (але не більше 10 балів на семестр).

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

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

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

1. Поточний контроль: опитування на комп'ютерних практикумах, МКР, захист РР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.
3. Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

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

- роботу з комп'ютерного практикуму (7 тем занять);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);
- виконання розрахункової роботи (РР).

2. Критерії нарахування балів:

2.1. Робота з комп'ютерного практикуму:

- бездоганна робота – 9 балів;
- є певні недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – 8 балів;
- є недоліки у підготовці та/або виконанні роботи – 6 балів.

Робота не виконана або не захищена – 0 балів.

Оцінка за комп'ютерний практикум складається з балів за виконання та за захист, які оцінюються наступним чином:

Виконання роботи:

- робота виконана повністю і вірно протягом відведеного часу – **5 балів**;
- робота виконана майже повністю і вірно протягом відведеного часу або має не принципові неточності – 4 бали;
- робота виконана більше ніж наполовину протягом відведеного часу – 3 бали;
- робота виконана протягом відведеного часу менше, ніж наполовину, результати роботи містять грубі помилки, відсутність виконання роботи – 0 балів.

Якість захисту роботи:

- студент вірно і повністю виконав всі надані до захисту завдання (відповів на запитання) – **4 бали**;
- студент вірно виконав всі надані для захисту завдання, але допустив несуттєві неточності – 3 бали;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив ряд суттєвих неточностей – 2 бали;
- студент при виконанні завдання (відповідях на запитання) допустив суттєві неточності – 0 балів.

2.2. Модульний контроль.

Ваговий бал – **12 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 10 – 12 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 8 – 10 балів;

- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6 – 8 балів;
- незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – 0 балів.

2.3. Розрахункова робота.

Ваговий бал – **25 балів**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- творчо виконана робота, виконані всі вимоги до роботи – 23 – 25 балів;
- роботу виконано з незначними недоліками, виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки – 20 – 22 бали;
- роботу виконано з певними помилками, є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки – 17 – 19 балів;
- роботу не зараховано (завдання не виконане або є грубі помилки) – 0 балів.

3. Умовою отримання позитивної оцінки з календарного контролю є виконання всіх запланованих на цей час робіт (на час календарного контролю). На **першому календарному контролі** (8-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 36^1 = 18$ **балів**. На **другому календарному контролі** (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 63^2 = 32$ бали і зарахована розрахункова робота.

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 100 балів:

$$RC = r_{\text{пр}} + r_{\text{мкр}} + r_{\text{рр}} = 63 + 12 + 25 = 100 \text{ балів}$$

Для отримання заліку з кредитного модуля потрібно мати рейтинг не менше 60 балів, захистити всі комп'ютерні практикуми, написати МКР та захистити РР. Студенти, які наприкінці семестру мають рейтинг менше 60 балів, а також ті, хто хоче підвищити оцінку, виконують письмову залікову контрольну роботу і ця рейтингова оцінка є остаточною. Оцінка у такому випадку формується наступним чином: до оцінки, яку студент отримав за РР та МКР, додається оцінка за залікову роботу³. Завдання контрольної роботи складається з 6-8 задач різної складності. Максимальна кількість балів за залікову контрольну роботу – 63.

Кожне питання контрольної роботи оцінюється у 5-10 балів відповідно до системи оцінювання:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації або незначні неточності);
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);
- «незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.

Сума балів переводиться до залікової оцінки згідно з таблицею:

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

¹ Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 8 тижнів.

² Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 14 тижнів.

³ Бали за експрес-контроль та практичні роботи анулюються.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

- *Вимоги до оформлення розрахункової роботи, перелік запитань до МКР та залікової контрольної роботи наведені у Google Classroom «Чисельні методи в хімії і хімічних технологіях» (платформа Sikorsky-distance).*

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

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

к.т.н. доц. Бондаренко С.Г.

к.т.н. доц. Сангіновою О.В.

к.т.н. доц. Шахновським А.М.

Ухвалено кафедрою технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології (протокол № 19 від 30.06.2021 р.)¹

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 23.06.2021 р.)

¹ Силабус спочатку погоджується метод. комісією, а потім ухвалюється кафедрою.