



Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

1. Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Хімічні технології неорганічних, електродних матеріалів та водоочищення</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 година на 2 тижні (1 пара), комп'ютерний практикум 2 години на 1 тиждень (1 пара) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>к.т.н., доцент Концевой Сергій Андрійович serkon157@ukr.net</i> Комп'ютерні практикуми: <i>к.т.н., доцент Концевой Андрій Леонідович kontsev@xtf.kpi.ua; kontsev157@gmail.com</i> <i>к.т.н., доцент Концевой Сергій Андрійович serkon157@ukr.net</i>
Розміщення курсу	<i>Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance); доступ за запрошенням викладача</i>

2. Програма навчальної дисципліни

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

Світова тенденція з інтенсивного використання комп'ютерів та різноманітного програмного забезпечення в інженерній та науковій сферах потребує від користувачів не тільки вільного володіння стандартними програмами, а й здатності до створення власних програмних продуктів в різних середовищах. Поглиблене проблемно-орієнтоване вивчення програмування дає досвід інтенсивної інтелектуальної діяльності, ефективність якої майбутні хіміки-технологи можуть оцінити самостійно (працює програма як треба чи ні). Дисципліна «Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв» призначена активувати застосування студентами персональних комп'ютерів в навчальному процесі і, зокрема, при виконанні курсових проектів та магістерської дисертації, поглибити знання і вміння студентів з програмування в середовищі Excel (VBA) та MathCad, спеціалізованих бібліотек мови Python для Data Science та Orange data mining - системи візуального програмування для швидкого якісного аналізу даних та їх інтерактивної візуалізації. Необхідність розробки нових алгоритмів та застосування сучасних методів обробки даних сприятиме більш якісному засвоєнню студентами технологічних аспектів дисциплін

спеціалізації. При вивченні цієї дисципліни 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.

Предмет дисципліни: Математичне моделювання виробництв неорганічних речовин та комп'ютерні засоби його реалізації.

Метою дисципліни є формування у студентів здатностей:

ЗК3 Здатність генерувати нові ідеї й нестандартні підходи до їх реалізації (креативність)

ЗК5 Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел

ЗК9 Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями

ФК25 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

ФК26 Здатність розробляти фізичні і математичні моделі досліджуваних процесів, явищ і виробництв неорганічної продукції і водоочищення

ФК27 Здатність ідентифікувати, аналізувати і з науково-обґрунтованою аргументацією планувати стратегію вирішення хіміко-технологічних проблем і задач виробництв неорганічної продукції і водоочищення

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

ЗНАННЯ:

- можливостей ПК в вирішенні розрахункових проблем процесів неорганічних виробництв;
- 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 VBA та/або Python) розрахунку матеріального, теплового балансів конкретного виробництва або апарату;
- послідовності конструктивного розрахунку реакторів різного типу;
- методів і програмних принципів обробки даних на мові Python;
- методів аналізу даних у програмі Orange data mining.

УМІННЯ:

- користуватись стандартним програмним забезпеченням середовища Excel (VBA), MathCad, спеціалізованими бібліотеками Python (NumPy, Pandas, Scikit-learn) у середовищі Jupiter Notebook, програмою Orange data mining при вирішенні проблем, пов'язаних з курсовим проектуванням і обробкою даних магістерської дисертації;

- змінити і доповнити алгоритми і програми кафедри ТНР, В та ЗХТ відповідних розрахунків з тем комп'ютерних занять;

- розробити індивідуально власні програми розрахунків (в тому числі з застосуванням графічних ресурсів) з теми комп'ютерних занять;

- застосувати методи Data Science у вказаних вище середовищах для аналізу даних за темою наукового або інженерного дослідження;

ДОСВІД:

– використання методів комп'ютерного моделювання та оптимізації складних систем.

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

Навчальний матеріал дисципліни «Комп'ютерні технології в процесах неорганічних виробництв» базується на знаннях і вміннях, отриманих при навчанні за бакалаврською програмою підготовки. Вимагаються базові знання середовищ Excel (VBA), MathCAD, Python та основних технологій неорганічних речовин.

Дисципліни, які базуються на результатах навчання: Дисципліни спеціалізації 1 і 2 семестрів магістерської підготовки, виконання курсових проектів, виконання і підготовка до захисту магістерської дисертації.

Зміст навчальної дисципліни

Розділ 1. Математичне моделювання процесів неорганічних виробництв

Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel

Тема 1.2 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в пакеті MathCad

Розділ 2. Сучасні системи обробки даних

Тема 2.1 Використання середовища Orange data mining для аналізу даних

Тема 2.2 Створення моделей складних систем методами машинного навчання у Google CoLab

5. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології (електронні версії). Навчальний посібник [1] надано для студентів у класрум і електронному кампусі, легкий доступ до нього – на комп'ютерах в лабораторії 157-4. Обов'язковою до вивчення є базова література, особливо [1], інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

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. Мартынова О.И. Водоподготовка. Расчеты на персональном компьютере / О.И. Мартынова, А.В. Никитин, В.Ф. Очков. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 216 с.
3. Копылов А.С. Водоподготовка в энергетике: Учебное пособие для вузов / А.С. Копылов, В.М. Лавыгин, В.Ф. Очков – М.: Издательство МЭИ, 2003. – 310 с.
4. Запольский А.К. Фізико-хімічні основи технології очищення стічних вод: Підручник / А.К. Запольский, Н.А. Мішкова-Кліменко, І.М. Астрелін. – К.: Лібра, 2000. – 552 с.
5. Громогласов А.А. Водоподготовка: процессы и аппараты / А.А. Громогласов, А.С. Копылов, А.П. Пильщиков. М.: Энергоатомиздат, 1990. – 272 с.
6. Складання матеріальних балансів та розрахунки технологічних параметрів на їх основі.
Режим доступу:
<https://drive.google.com/file/d/0B5pnts05mEIXY19Vc2p3dnJ6TEU/view?usp=sharing>

Додаткова

7. Анализ данных просто и доступно (Orange data mining). Режим доступу: https://youtube.com/playlist?list=PLUfHxBkkFMSfvgd_rAzt8iM9foo9sbcFx
8. Очков В.Ф. Анализ изотерм ионного обмена в среде Mathcad / В.Ф. Очков, А.П. Пильщиков, А.П. Солодов, Ю.В. Чудова // Теплоэнергетика, №7, 2003. – С. 13 - 18.
9. Концевой А.Л. Аналіз статистики і динаміки обміну іонів різного заряду. / А.Л. Концевой, С.А. Концевой, О.О. Таргонська // Вода і водоочисні технології. Науково-технічні вісті. – №2(8), 2012. – С.50-58.
10. Машинное обучение. Режим доступу: <https://stepik.org/course/8057/syllabus>
11. Введение в Data Science и машинное обучение. Режим доступу: <https://stepik.org/course/4852/syllabus>

Інформаційні ресурси

1. Дистанційний курс Google G Suite for Education. Режим доступу: Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance).
2. На сайті С.А. Концевого (потрібна авторизація) <https://sites.google.com/site/tnrkoj/>

4. 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 застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Дата	Опис заняття
		Розділ 1. Математичне моделювання процесів хімічних технологій
1	2 тиждень навчання	<i>Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel</i> Ітераційні розрахунки. Числове інтегрування. Приклади реалізації. <i>Тема 1.2 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в пакеті MathCad</i> Рішення завдань з вищої математики у MathCad. Програмування у цій системі. Основні переваги та недоліки системи MathCad.
		Розділ 2. Сучасні системи обробки даних
		<i>Тема 2.1 Використання середовища Orange data mining для аналізу</i>

		<i>даних.</i>
2	4 тиждень навчання	Побудова візуальних моделей аналізу даних на основі машинного навчання.
3	6 тиждень навчання	Основні напрями застосування машинного навчання – регресійний аналіз, класифікація та кластеризація даних. 1-а частина
4	8 тиждень навчання	Основні напрями застосування машинного навчання – регресійний аналіз, класифікація та кластеризація даних. 2-а частина
		<i>Тема 2.2 Створення моделей складних систем методами машинного навчання у Google CoLab</i>
5	10 тиждень навчання	Основи аналізу даних на платформі Anaconda (Python) та Google CoLab.
6	12 тиждень навчання	Основні напрями застосування машинного навчання – регресійний аналіз, класифікація та кластеризація даних. 1-а частина
7	14 тиждень навчання	Основні напрями застосування машинного навчання – регресійний аналіз, класифікація та кластеризація даних. 2-а частина
8	16 тиждень навчання	Застосування методів AutoML для автоматичного обрання алгоритму обробки даних.
9	18 тиждень навчання	Використання платформи kaggle.com для аналізу даних на мові Python.

Комп'ютерний практикум

Метою комп'ютерних занять є опанування і закріплення на практиці знань та умінь, отриманих в процесі вивчення кредитного модуля, а саме використання методів комп'ютерного моделювання складних систем і обробки даних. Реалізацію наступних тем пропонується виконати кожним студентом на персональному комп'ютері шляхом створення відповідних програмних файлів із застосуванням програмних середовищ (MS Excel, MathCAD, Orange data mining, Python). Порядок виконання завдань практикуму (Розділ 1) надано у кафедральному навчальному посібнику [1].

<i>Тиждень</i>	<i>Тема</i>	<i>Опис запланованої роботи</i>
Розділ 1. Математичне моделювання процесів неорганічних виробництв		
Тема 1.1 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в середовищі Excel		
1	Розрахунок очищення коксового газу від сірководню	Відповідно до отриманого індивідуального завдання розрахувати в середовищі Excel матеріальний і тепловий баланси та тарілчастий абсорбер. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
2	Розрахунок паро – повітряної конверсії метану	Відповідно до отриманого індивідуального завдання розрахувати в середовищі Excel матеріальний і тепловий баланси. Виконати кінетичний розрахунок шахтного конвертору. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.

3	Розрахунок матеріального балансу синтезу аміаку	Відповідно до отриманого індивідуального завдання вирішити систему 13 рівнянь методом ітерації для складання матеріального балансу. Надати таблиці складу потоків для 9 точок технологічної схеми. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
4	Розрахунок матеріального балансу синтезу метанолу	Відповідно до отриманого індивідуального завдання визначити витратний коефіцієнт за свіжим газом методом ітерації та скласти матеріальний баланс циклічного процесу. Надати таблиці складу потоків для окремих точок технологічної схеми. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
Тема 1.2 Математичні моделі реакцій і процесів та їх рішення в пакеті MathCad		
5	Розрахунок трубчатого реактора конверсії природного газу	Відповідно до отриманого індивідуального завдання розрахувати в середовищі MathCAD об'єм каталізатору шляхом інтегрування кінетичного рівняння.. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
6	Розрахунок рівноваги пароповітряної конверсії метану	Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати в середовищі MathCAD розв'язок системи нелінійних рівнянь і розрахувати рівноважний склад конвертованого газу. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
7	Розрахунок окиснення оксиду сульфуру (IV)	Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати засобами MathCAD (матричний підхід) розрахунок матеріального і теплового балансів чотири поличного реактору. Виконати кінетичний розрахунок (інтегрування). Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
8	Розрахунок поличних колон синтезу аміаку.	Відповідно до отриманого індивідуального завдання вирішити інтегруванням кінетичного рівняння час контактування і об'єм каталізатору чотири поличної колони синтезу Надати таблиці складу потоків входу і виходу з полиці. Продемонструвати розрахунки і роботу програми викладачу.
9	Розрахунок паровуглекислотної конверсії природного газу	Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати в середовищі MathCAD розв'язок системи нелінійних рівнянь і розрахувати рівноважний склад конвертованого газу. Продемонструвати розрахунки і роботу програми

Тема 1

		викладачу
10	Модульна контрольна робота	Відповідно до отриманого індивідуального завдання виконати в середовищі Excel і MathCAD програмування відповідних розрахунків
Розділ 2. Сучасні системи обробки даних		
Тема 2.1 Використання середовища Orange data mining для аналізу даних		
11	Апроксимація складних багатофакторних залежностей.	Виконати задачу регресійного аналізу. Приклад з відео [7] та за даними з попередньої практики. Обрати відповідну практику самостійно та згенерувати вихідні дані, виконавши багатоваріантний розрахунок.
12	Рішення задачі класифікації.	Виконати задачу класифікаційного аналізу на датасеті Titanic. Адаптувати цю методичку до даних з хімії (наприклад, прогнозування каталітичних можливостей обраної речовини у даному процесі). Знайти відповідні дані самостійно.
13	Кластеризація вихідних даних.	Виконати приклад кластеризації з [7]. Згенерувати вихідні дані з попередньої практики (розділ 1) та використати їх замість даних у прикладі.
Тема 2.2 Створення моделей складних систем методами машинного навчання у Google CoLab		
14	Основи аналізу даних на платформі Anaconda (Python) та Google CoLab.	Виконати одну з практик Теми 1.1 та 1.2 у середовищі Google CoLab
15	Апроксимація складних багатофакторних залежностей.	Виконати дві задачі регресійного аналізу з Практики №11 у середовищі Google CoLab.
16	Рішення задачі класифікації.	Виконати дві задачі класифікації з Практики №12 у середовищі Google CoLab.
17	Кластеризація вихідних даних.	Виконати дві задачі кластеризації вихідних даних з Практики №13 у середовищі Google CoLab.
18	Використання платформи kaggle.com для аналізу даних на мові Python.	Погодити з викладачем індивідуальне завдання на платформі kaggle.com (регресійного аналізу) та виконати його 3-ма різними способами (методами та їх комбінацією за необхідності). Порівняти власний результат з результатами на платформі.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) в кількості 36 годин протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, виконання і оформлення розрахункової роботи, підготовка до МКР і заліку. 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	3 години на тиждень, разом 54 годин
Виконання розрахункової роботи	6
Підготовка до МКР і заліку	6 годин

7. Політика та контроль

8. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та практикуми проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, практикуми – шляхом виконання завдань на домашньому комп'ютері. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та практикумів є обов'язковим.

На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів, наприклад, Google Forms. Перед початком чергової теми лектор може надіслати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. Несвоєчасне виконання комп'ютерного практикуму без поважної причини штрафуються 1 балом;
2. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;
3. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 3 заохочувальних балів;
4. 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.

9. 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 лекціях, виконання практикумів.

2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силябусу.
3. Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. **Рейтинг студента з дисципліни розраховується виходячи із 100-бальної шкали. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:**

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

2. Критерії нарахування балів:

2.1 Робота на комп'ютерних заняттях:

Ваговий бал – 3. Максимальна кількість балів на комп'ютерних заняттях дорівнює:
 $3 \text{ балів} * 16 = 48 \text{ балів.}$

Критерії оцінювання:

3 бали: безпомилкове виконання та оформлення завдання (розрахунку) *під час поточного заняття*;

2,25 бали: вірне в цілому рішення з незначними недоліками в оформленні, або похибками окремих елементів розрахунку, здача роботи під час наступного заняття;

1,5 бал: виконання вірного розрахунку після навідної допомоги викладача або проведення розрахунку зі значущими помилками, які підлягають виправленню; здача роботи під час наступного заняття;

0 балів: відсутність на занятті без поважних причин.

2.2 Самостійне проходження on-line курсів [10,11] за 2-ма темами другого розділу

Кількість завдань цього виду: 2.

Ваговий бал – 15. Всього максимально – $2 * 15 = 30$ балів.

Критерії оцінювання:

Відсоток проходження on-line курсу та отримані бали (їх середнє значення у 100 бальній системі або відсоток на отриманому Сертифікаті). Розрахунок за окремим on-line курсом:
 $\text{відсоток} * 15 / 100.$

2.3 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.

2.4 Розрахункова робота –семестрове індивідуальне завдання

Ваговий бал $r_{сз}$ – 12.

12 балів: повне розкриття змісту завдання при бездоганному оформленні до 17 тижня навчання;

9 балів: повне розкриття змісту завдання без зауважень або з незначними зауваженнями при бездоганному оформленні до 18 тижня навчання;

6 балів: достатньо повне розкриття змісту завдання при наявності зауважень не принципового характеру та оформленні до початку сесії;

4 бали: недостатнє або дуже слабе розкриття змісту завдання з великою кількістю помилок і зауважень принципового характеру при оформленні під час сесії.

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 $0,5 \cdot 50^1 = 25$ балів. На другому календарному контролі (14-й тиждень) студент отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше $0,5 \cdot 80^2 = 40$ балів.

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

$$R_c = r_{\text{комп}} + r_c + r_{\text{МКР}} + r_{\text{рр}} = 48 + 30 + 10 + 12 = 100 \text{ 100 балів}$$

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: $r_c = 0,6 R_c = 0,6 \times 100 = 60$ 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 його рейтингова оцінка **RD** переводиться згідно з таблицею (див. нижче).

Якщо семестровий рейтинг студента дорівнює 60 балам і більше, він має право на отримання заліку «автоматом» (безпосередньо за результатами роботи в семестрі) згідно нижче наведеної таблиці. Якщо рейтинг менше 60 він виконує додаткові завдання. Рейтингова оцінка з кредитного модуля у разі виконання залікової контрольної роботи визначається як сума балів із залікової контрольної роботи $r_{\text{кр}}$ та балів із семестрового індивідуального завдання (розрахункової роботи), що дорівнює $r_{сз} = 12$.

Розмір шкали оцінювання залікової контрольної роботи дорівнює:

$$r_{\text{кр}} = 100 - r_{сз} = 88.$$

Критерії залікової контрольної роботи (за 100 бальною шкалою):

100 - 95 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;

94 - 85 балів: достатньо повна і взагалі вірна відповідь з 80% розкриттям питання, відповідь ґрунтується тільки на матеріалах конспекту;

84 – 75 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;

74 - 65 балів: неповна відповідь з 30 % розкриттям питання; наявність принципових помилок;

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

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

64 - 60 балів: неповна відповідь з 20 % розкриттям питання; наявність великої кількості суттєвих і принципів помилок;

Отриманий результат (ОР) перераховується у 88 бальну систему за формулою $OP * 88 / 100$.

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

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

$RD = r_{сз} + r_{кр}$ або $RD = R_c$	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

10. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ ДЛЯ САМОПЕРЕВІРКИ ЗНАНЬ

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 підготовки води і водоочищення та вміння програмування визначає успішність засвоєння вибіркової дисципліни (кредитного модуля).

1. 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.

2. 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 багато поличній колоні синтезу. Необхідність продування. Шляхи застосування продувального газу. Методи рішення систем нелінійних рівнянь при розрахунку матеріального балансу синтезу аміаку. 3. Шляхи інтенсифікації іонообмінних процесів. Конструкції фільтрів, область застосування, переваги і недоліки. Регенерація катіонітів і аніонітів: реакції, обґрунтування концентрації регенераційних розчинів.

3. 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 програмних середовищах.

4. 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.

5. Фізико-хімічні основи каталітичного окиснення SO_2 у SO_3 : рівновага, каталізatori, 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.

6. Методи рішення диференціальних рівнянь та їх систем. Відповідні програмні засоби у різних середовищах.

7. Рішення математичних задач (інтегрування, рішення нелінійних рівнянь та їх систем) у символічному вигляді та чисельно у середовищі MathCad.

8. Методи рішення диференційних рівнянь та їх систем. Відповідні програмні засоби у різних середовищах.
9. Рішення математичних задач (інтегрування, рішення нелінійних рівнянь та їх систем) у символічному вигляді та чисельно у середовищі MathCad.
10. Реалізація функцій у середовищі Python. Організація взаємодії функцій Python та застосування необхідних бібліотек.
11. Відмінності версій 2 та 3 мови Python.
12. Он-лайн середовище для застосування мови Python та додаткових пакетів.
13. Основні вбудовані та додаткові статистичні бібліотеки для Python.
14. Відмінність статистичних розрахунків у середовищі Excel та Python.
15. Методика використання середовища Orange для аналізу даних.
16. Основні задачі аналізу даних.
17. Основні задачі для застосування штучних нейронних мереж.
18. Способи реалізації штучних нейронних мереж у середовищах Orange data mining та Google Colab.
19. Особливість використання платформи kaggle.com для рішення задач аналізу даних.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено доцентами кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології: к.т.н. доц. Концевой С.А. к.т.н. доц. Концевой А.Л.

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

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

¹ Силабус спочатку погоджується метод. Комісією, а потім Ухвалюється кафедрою.