



# ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ В ХІМІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ

## Робоча програма освітньої компоненти (Силабус)

### — Реквізити освітньої компоненти

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>Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення</i>
Статус освітньої компоненти	<i>вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна (денна), заочна/змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>4 курс, весняний семестр</i>
Обсяг освітньої компоненти	<i>4 кредити, 120 год. (Лекції 36 год., комп'ютерний практикум 36 год., СРС 48 год.)</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік письмовий</i>
Розклад занять	<i>Лекція 4 години на тиждень (2 пари), комп'ютерний практикум 4 години на тиждень (2 пари) за розкладом на <a href="http://schedule.kpi.ua">schedule.kpi.ua</a></i>
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>к.т.н., доцент Шахновський Аркадій Маркусович, AMShakhn@xtf.kpi.ua</i> Комп'ютерні практикуми: <i>к.т.н., доцент Шахновський Аркадій Маркусович, AMShakhn@xtf.kpi.ua</i>

### — Програма освітньої компоненти

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

Вміння вирішувати фахові прикладні із використанням сучасних комп'ютерів є ключовим для бакалавра з хімічних технологій та інженерії. Для впорядкування процесу вирішення на комп'ютері складних прикладних задач хімічної технології після оцінювання вихідної інформації та постановки задачі на змістовному рівні, а потім та їх формалізації необхідна алгоритмізація задач, тобто розробка (або вибір) алгоритму вирішення поставленої задачі і програми реалізації обраного.

**Предмет освітньої компоненти:** алгоритми реалізації математичних методів розв'язання типових інженерних задач хімії та хімічної технології, та комп'ютерні засоби їх реалізації.

**Метою** освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти здатностей:

- Використовувати програмне забезпечення для вирішення експериментальних і практичних завдань у хімічних технологіях та інженерії.
- Реалізовувати алгоритми опрацювання та візуалізації для вирішення типових завдань у хімічних технологіях та інженерії.

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

**ЗНАННЯ:**

- найбільш поширені комп'ютерні пакети для розв'язування задач хімії і хімічної технології та прийоми їх застосування;
- алгоритми опрацювання результатів експериментальних досліджень в галузі хімії і хімічної технології;
- сучасні комп'ютерні технології для візуалізації даних при вирішенні інженерних задач хімії та хімічної технології на комп'ютері.

**УМІННЯ:**

- розв'язувати задачі хімії та хімічної технології у сучасному програмному забезпеченні;
- опрацьовувати результати експериментальних досліджень за допомогою сучасних комп'ютерних технологій;
- використовувати сучасні пакети прикладних програм для розв'язання типових задач хімії і хімічної технології.

**ДОСВІД:**

- використання алгоритмів реалізації методів візуалізації даних для розв'язання типових задач хімії і хімічної технології;
- застосування сучасного програмного забезпечення для виконання інженерних розрахунків.

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

Пререквізити: перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні здобувачеві вищої освіти для успішного засвоєння освітньої компоненти

Загальна та неорганічна хімія.	Властивості сполук хімічних елементів, що найчастіше застосовуються у хімічній промисловості, властивості речовин, що становлять основу конструкційних матеріалів; що можуть утворюватися при певних умовах і впливати на стан матеріалів, на здоров'я людини, на стан навколишнього середовища.
Інформаційні технології	Базові принципи опрацювання та візуалізації інформації в програмних пакетах загального призначення, зокрема, електронних таблицях MS Excel.
Загальна хімічна технологія	Базові уявлення про основи хімічної термодинаміки та закони хімічної кінетики, про принципи структурної організації та типові функції і механізми роботи технологічних об'єктів хімічних виробництв;

Постреквізити освітньої компоненти: освітні компоненти (включаючи курсові та дипломні роботи і проекти), в рамках яких передбачено пошук, зберігання, комп'ютерну обробку (аналіз) інформації, виконання інженерних розрахунків та підготовку звітів.

**3. Зміст освітньої компоненти**

Тема 1. Загальні принципи застосування програмного забезпечення для вирішення задач з хімії та хімічної технології

Тема 2. Опрацювання результатів експериментальних досліджень у пакеті Origin.

Тема 3 Організація обчислювальних робіт в електронних таблицях.

Тема 4 Організація обчислень у середовищі MathCAD.

Тема 5 Основні засади комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних схем

#### 4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету, електронному кампусі КПІ та на сайті кафедри технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології та розміщені на електронному ресурсі ELAKPI. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими здобувач вищої освіти має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

##### Базова:

1. *Introduction to Software for Chemical Engineers, Second Edition*. Ed. By Mariano Martín Martín. CRC Press, 2019. 802 p.
2. Комп'ютерне моделювання процесів і систем: Організація розрахунків у середовищі MathCAD [Електронний ресурс]: навчальний посібник / КПІ ім. Ігоря Сікорського: уклад.: О.О. Квітка, А.М. Шахновський. – Електронні текстові дані (1 файл 4,84 Мбайт). – К.: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. – 89 с.
3. 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. Кривець. – Електронні текстові дані (1 файл: 5.45 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. – 208 с.

##### Додаткова:

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.*
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.*
6. *Chemical Engineering Process Simulation. 2nd Edition*. Ed by Dominic Foo. Elsevier, 2022. 496 p.

##### Інформаційні ресурси:

7. *Chemistry software*. URL: <https://library.bath.ac.uk/chemical-engineering/essential-reading>
8. *Top Computer/Software Skills For Chemical Engineers*. URL: <https://www.theengineersperspectives.com/chemical-engineer-computer-skills/>
9. *Top 10 Software Used by Chemical Engineers*. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=SIWgyERksWo>
10. *Дистанційний курс Google G Suite for Education*. Режим доступу: Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance)

#### – Навчальний контент

#### 5. Методика опанування освітньої компоненти

##### Лекційні заняття

Вичитування лекцій з освітньої компоненти проводиться паралельно з виконанням здобувачами вищої освіти лабораторного (комп'ютерного) практикуму з розглядом 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 [10]. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Опис заняття
1	<p>Тема 1. Загальні принципи застосування програмного забезпечення для вирішення задач з хімії та хімічної технології</p> <p>Предмет вивчення і задачі освітньої компоненти. Принципи застосування поширеного сучасного програмного забезпечення для вирішення задач хімії і хімічної інженерії.</p>
2	Тема 1 (продовження). Особливості використання Microsoft Excel, PTC Mathcad, Origin, ChemCAD для вирішення задач хімії і хімічної інженерії.
3	Тема 2. Опрацювання результатів експериментальних досліджень у пакеті Origin.
4	Тема 3 Організація обчислювальних робіт в електронних таблицях.
5	Тема 3 (продовження). Візуалізація даних в електронних таблицях.
6	Тема 3 (продовження). 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.
7	Тема 4 Організація обчислень у середовищі MathCAD. Найбільш поширені версії MathCAD. Головні елементи інтерфейсу MathCAD. Принципи обчислень у MathCAD. Введення і редагування виразу.
8	Тема 4 (продовження). Розрахунок за формулою. Задавання діапазону значень. Розрахунок суми, добутку. Визначення функції користувача.
9	Тема 4 (продовження). Принципи проведення символічних обчислень. Виконання символічних алгебраїчних перетворень.
10	Тема 4 (продовження). Деякі операції з матрицями у середовищі MathCAD. Створення матриці. Робота з окремими елементами матриці. Операції з кількома матрицями. Взаємодія MathCAD із зовнішніми файлами даних.
11	Тема 4 (продовження). Створення графіків у середовищі MathCAD.
12	Тема 4 (продовження). Розв'язання рівнянь у середовищі MathCAD.
13	Тема 5 Основні засади комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних схем.
14	Тема 5 (продовження). Моделювання об'єктів хімічної технології з використанням пакету прикладних програм ChemCAD: випадок окремого апарату.
15	Тема 5 (продовження). Моделювання об'єктів хімічної технології з використанням пакету прикладних програм ChemCAD: випадок технологічної схеми
16	Написання модульної контрольної роботи.
17	Захист розрахункової роботи.
18	Підсумкове заняття. До відома здобувачів вищої освіти доводиться кількість балів, яку вони набрали протягом семестру. Здобувачі вищої освіти, які були не допущеними до семестрової атестації з кредитного модуля, мають усунути причини, що призвели до цього.

## Лабораторний (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 одержання досвіду розв'язання практичних задач хімії і хімічної технології шляхом застосування алгоритмів реалізації розрахунків на основі сучасних програмних середовищ.

Номер практикуму	Тема	Опис запланованої роботи
1.1	Дослідження спеціальних засобів роботи в електронних таблицях для потреб хімічних технологій	Відповідно до отриманого завдання дослідити спеціальні засоби роботи в електронних таблицях для потреб хімічних технологій. 1. Організація найпростіших балансових розрахунків у MS Excel.
1.2		2. Організація матричних розрахунків у MS Excel.
1.3		3. Розрахунок матеріальних балансів ХТС у MS Excel із застосуванням інтегрального підходу на базі загальної матричної моделі ХТС
1.4		4. Дослідження методів візуалізації даних у MS Excel.
1.5		5. Дослідження спеціальних засобів організації розрахунків з використанням надбудов MS Excel
1.6		6. Дослідження базових прийомів роботи з програмою Origin.
1.7		7. Дослідження базових прийомів побудови 2D графіків в програмі Origin.
1.8		8. Дослідження базових прийомів налаштування графіків в програмі Origin.
1.9		9. Дослідження базових прийомів побудови 3D графіків в програмі Origin.
1.10		10. Дослідження методів організації розрахунків в програмі Origin: апроксимація даних.
1.11		11. Аналіз та обробка графічних даних в програмі Origin. Аналіз піків кривих в програмі Origin.
2.1	Прикладні хіміко-технологічні розрахунки з використанням пакету MathCAD	Відповідно до отриманого індивідуального завдання дослідити засоби виконання прикладних хіміко-технологічних розрахунків з використанням пакету MathCAD. 1. Дослідження базових прийомів роботи з програмою MathCAD
2.2		2. Дослідження засобів візуалізації даних у програмі MathCAD
2.3		3. Організація найпростіших балансових розрахунків у MathCAD
2.4		4. Розрахунок матеріальних балансів ХТС у MathCAD
3.1	Моделювання об'єктів хімічної технології з використанням пакету прикладних програм ChemCAD	Відповідно до отриманого індивідуального завдання вивчити загальні принципи моделювання об'єктів хімічної технології з використанням пакету прикладних програм ChemCAD. 1. Дослідження базових прийомів роботи з програмою ChemCAD.
3.2		2. Дослідження прийомів налаштування комп'ютерних моделей в програмі ChemCAD.
3.3		3. Дослідження процесу комп'ютерного моделювання та аналізу результатів розрахунків у програмі ChemCAD.



## 6. Самостійна робота

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 розрахункової роботи. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид самостійної роботи	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 МКР (повторення матеріалу)	6 годин

## 8. Індивідуальні завдання

Для більш ґрунтовного опанування програмного матеріалу освітньої компоненти здобувач вищої освіти одержує індивідуальне завдання на розрахункову 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 виробничих проблем.

## – Політика та контроль

### 7. Політика освітньої компоненти

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 (за винятком форс-мажорних обставин, спеціально оговорених статутними документами КПІ ім. Ігоря Сікорського).

На початку кожної лекції лектор може проводити опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms, 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 здобувачі вищої освіти, 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.

### Правила призначення заохочувальних балів:

1. За модернізацію робіт нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
2. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з освітньої компоненти нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;
3. 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 лекціях, оцінка рівня виконання завдань комп'ютерного практикуму і МКР, захист РР.
2. Семестровий контроль: залік.

### **Рейтингова система оцінювання результатів навчання**

1. Рейтинг здобувача вищої освіти з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, що складається з балів, що здобувач вищої освіти 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:**

Ваговий бал – **65 балів**. Оцінювання практикумів проводиться за наступною шкалою:

- вірно і повністю виконані завдання, виконані всі вимоги до оформлення – 65– 60 балів;
- роботу виконано з незначними недоліками, виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки – 59,9 – 20 балів;
- роботу виконано з певними помилками, є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки – 11,9 – 9,6 балів;
- роботу не зараховано (завдання не виконане або є грубі помилки) – 0 балів.

#### **2.2. Модульний контроль.**

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

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 12 – 10,1 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), або повна відповідь з незначними неточностями – 10,0 – 6,8 балів;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 6,7 – 5,4 балів;
- незадовільна відповідь (не відповідає вимогам на «задовільно») – 0 балів.

#### **2.3. Розрахункова робота.**

Ваговий бал – **23 бали**. Оцінювання роботи проводиться за наступною шкалою:

- творчо виконана робота, виконані всі вимоги до роботи – 23– 20 балів;

- роботу виконано з незначними недоліками, виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки – 19,9 – 12 балів;
- роботу виконано з певними помилками, є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки – 11,9 – 9,6 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) здобувач вищої освіти отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 21^1 = 10$  балів. На **другому календарному контролі** (14-й тиждень) здобувач вищої освіти отримує «зараховано», якщо його поточний рейтинг не менше  $0,5 \cdot 42^2 = 21$  балу і зарахована розрахункова робота.

4. Відповідно до «Положення про організацію навчального процесу в НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського», необхідною умовою допуску заліку є зарахування всіх практикумів, а також МКР і РР. Для отримання заліку з кредитного модуля «автоматом» потрібно мати рейтинг не менше 60 балів.

Здобувачі вищої освіти, які наприкінці семестру мають рейтинг менше 60 балів, а також ті, хто хоче підвищити оцінку в системі ECTS, виконують залікову контрольну роботу. При цьому бали за залікову контрольну роботу є остаточними (попередні бали скасовано). Завдання залікової контрольної роботи складається з чотирьох питань різних тем робочої програми. Додаткові питання з тем пропущених лекцій отримують здобувачі вищої освіти, які без поважної причини були на них відсутні. Незадовільна відповідь з додаткового питання знижує загальну оцінку на 4 бали.

Кожне питання залікової контрольної роботи оцінюється у 25 балів відповідно до системи оцінювання:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 25–22,5 бал;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації або незначні неточності) – 22,4–18,8 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 18,7–15 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь – 0 балів.

Сума балів за кожне з чотирьох запитань залікової контрольної роботи переводиться до залікової оцінки згідно з таблицею 1.

Таблиця 1.

Бали	Оцінка
100...95	Відмінно
94...85	Дуже добре
84...75	Добре
74...65	Задовільно
64...60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не зараховано розрахункову роботу, або є не зараховані практичні роботи, або $r_c < 60$	Не допущено

Максимальна сума балів, яку здобувач вищої освіти може набрати протягом семестру, складає 100 балів:

$$RC = r_{пр} + r_{мкр} + r_{рр} = 65 + 12 + 23 = 100 \text{ балів}$$

<sup>1</sup> Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 8 тижнів.

<sup>2</sup> Максимальна кількість балів, яку може набрати студент протягом 14 тижнів.



Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

<i>Кількість балів</i>	<i>Оцінка</i>
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

*Вимоги до оформлення розрахункової роботи, перелік запитань до МКР, посилання на веб-ресурси з тем курсу наведені у Google Classroom [10] (платформа Sikorsky-distance).*

### Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

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

к.т.н. доц. Шахновським А.М.

**Ухвалено** кафедрою технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології (протокол №29 від 28.06.2023р.)<sup>3</sup>

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

---

<sup>3</sup> Силабус спочатку погоджується метод. комісією, а потім Ухвалюється кафедрою.