

Структура програми навчальної дисципліни **“Обчислювальна техніка, основи програмування”,** **опис дисципліни**

Мета навчальної дисципліни: засвоєння теоретичних основ інформатики, програмування та роботи на сучасних ЕОМ; набуття практичних навичок роботи на комп'ютерах в середовищі *Windows*, з пакетами офісних програм *Microsoft Office*; методами математичного моделювання, прогнозування та оптимізації перебігу складних хіміко-технологічних процесів; засвоєння елементів програмування на одній із мов високого рівня (*Basic*); вміння застосування одержаних знань для рішення хіміко-технологічних задач з використанням комп'ютерів; отримання умінь щодо прийняття самостійних рішень.

1. Пояснювальна записка

На сучасному етапі курс “Інформатика, обчислювальні машини, програмування” є базовим у циклі хімічних та хіміко-технологічних дисциплін, служить теоретичним і практичним фундаментом при обробці експериментальних даних, моделюванні та оптимізації складних хіміко-технологічних процесів. Дана програма курсу складена у відповідності з сучасним рівнем розвитку інформатики, програмування та вимогами, які ставляться до підготовки фахівців високої кваліфікації, вона спеціалізована по профілю хімічних спеціальностей вузів. Послідовність розміщення і обсяг матеріалу в програмі є традиційним при викладанні цього курсу в більшості вузів України. Водночас слід відзначити, що порядок викладання окремих розділів такий, що враховує специфіку слухача – студента-хіміка та відповідної спеціалізації. Курс “Обчислювальна техніка, основи програмування” читається на I-му курсі протягом двох семестрів (1,2-й семестр), які закінчуються заліками. Структура курсу складається з п'яти змістових модулів, які включають в себе як одержання теоретичних базових знань студентами під час лекційних аудиторних занять, так і їх засвоєння на практичних і лабораторних заняттях. Під час лекцій розглядаються основні теоретичні питання: інформатика як наук, інформаційні потоки, структура сучасних ЕОМ, теорія алгоритмізації, програмування в середовищі *Basic*, ОС *Windows*, робота з файлами з використанням програми *Explorer*, пакетами офісних програм *Word for Windows* та *Excel for Windows*, редактором програми для наукової графіки *Origin*, основні напрямки використання ЕОМ в хімії та хімічній технології, регресійний аналіз, методи планування та оптимізації процесів. На практичних і лабораторних заняттях відбувається закріплення на практиці теоретичних знань, що одержані на лекціях та забезпечення набуття практичних навичок і досвіду роботи в середовищі *Windows-9x* і розв'язання хімічних задач за допомогою методів математичного моделювання на ЕОМ типу *IBM PC*. Тематика практичних та лабораторних робіт повністю відповідає програмі курсу і охоплює найбільш важливі теми. Робота викладача з студентами спрямована на досягнення високого рівня володіння сучасною комп'ютерною технікою, прикладним програмним забезпеченням та роботою в середовищі алгоритмічної мови програмування *Basic*. Вивчення курсу потребує використання знань студентів з курсів вищої математики, загальної та неорганічної хімії, органічної хімії, хімічної технології. Основною базою його вивчення є знання, що були надані в загальноосвітній середній школі.

Цілі: – засвоєння студентами теоретичних основ інформатики, програмування та роботи на сучасних ЕОМ. Без знання теоретичних основ неможливе практичне використання обчислювальної техніки.

Кваліфікаційні вимоги до знань, умінь та навичок які ставляться до студента**Студент повинен:**

а) знати: основні теоретичні питання інформатики як науки, інформаційні потоки, структуру сучасних ЕОМ, теорію алгоритмізації, програмування в середовищі Basic, ОС Windows, роботу з файлами з використанням програми Explorer, використання пакетів офісних програм Word for Windows та Excel for Windows, редактора програми для наукової графіки Origin, основні напрямки використання ЕОМ в хімії та хімічній технології, регресійний аналіз, методи планування та оптимізації процесів.

б) вміти: працювати на сучасних ЕОМ з використанням сучасних операційних систем Windows, використовувати для роботи пакети прикладних програм Microsoft Office Word for Windows та Excel for Windows, а також редактора програми для наукової графіки Origin, вміти застосовувати для проведення дослідів в хімічних лабораторіях методів планування, оптимізації та прогнозування на основі складання математичних моделей хімічних реакцій.

2. СТРУКТУРА ОРГАНІЗАЦІЇ НАВЧАЛЬНОГО ПРОЦЕСУ

з курсу “Обчислювальна техніка, основи програмування”

№ модуля	Тематика змістових модулів, теми лекцій	Лабораторні роботи (по підгрупах)
	I-й семестр	
Модуль I: Загальні питання інформатики. Теорія алгоритмізації	Знайомство з предметом курсу та його основні задачі. Інформатика як наука. Структура ЕОМ та їх класифікація. Програмне забезпечення ЕОМ. (2 години).	Лабораторна робота №1
	Основні особливості використання ЕОМ в хімії. Математичні моделі хімічних процесів. Автоматизовані системи наукових досліджень (АСНД) (2 години).	
	Алгоритмізація наукових дисциплін. Теорія алгоритмізації. Алгоритмічні мови високого рівня. Етапи рішення задач на ЕОМ (2 години).	
Модуль II: Операційна система Windows-9x. Пакети прикладних програм MS Office	Операційна система Windows. Робочий стіл, головне меню, структура типового та діалогових вікон (2 години).	Лабораторна робота №2
	Операційна система Windows. Запуск програм на виконання, робота з довідниковою інформацією, пошук файлів, архівація файлів, антивірусні програми (2 години).	
	Програма Explorer (Провідник) (2 години).	Лабораторна робота №3
	Робота з текстовим редактором Word for Windows (2 години).	Лабораторна робота №4
	Робота з електронними таблицями Excel for Windows (2 години).	Лабораторна робота №5
	Робота з редактором програми для наукової графіки Origin (версії 3.5 та 4.1) (2 години).	Лабораторна робота №6
Модуль III: Програмування в середовищі BASIC	Основні команди алгоритмічної мови Basic. Величини, масиви. Вирази: арифметичні, логічні, відношення, функції (2 години).	
	Оператори мови Basic: присвоювання, процедури, переходу, умовні оператори, циклу. Оператори введення–виведення. Програми і підпрограми (2 години).	Лабораторна робота №7 Лабораторна робота №8
	Лекційна контрольна робота	
	II-й семестр	
Модуль IV: Регресійний аналіз експериментальн их даних (32 години).	Лінійна регресія. Лінеаризація нелінійних залежностей (2 години).	Лабораторна робота №9
	Кореляція між параметрами хіміко-технологічних систем (2 години).	
	Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних. Лінійне та нелінійне згладжування (2 години).	Лабораторна робота №10
	Емпірична формула регресії. Вибір формули розрахунку. Метод найменших квадратів (МНК) (2 години).	Лабораторна робота №11
Модуль V: Факторний аналіз (44 години)	Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проекції. Контурно-графічний метод аналізу. Перевірка відтворюваності дослідів (2 години).	Лабораторна робота №12
	Дво-, трифакторний експеримент. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу (2 години).	Лабораторна робота №13
	Метод центрального композиційного планування (ОЦКП). Оптимізація з використанням методів крутого сходження (2 години).	
	Симплексні методи в хімії. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів (2 години).	Лабораторна робота №14
	Оптимізація хіміко-технологічних процесів. Метод крутого сходження (2 години).	
	Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Синтез амоніаку (модельна задача) (2 години).	Лабораторна робота №15
	Векторний аналіз. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Термодинамічний аналіз хімічних реакцій (2 години).	Лабораторна робота №16
	Лекційна контрольна робота	
Всього годин:	40	

3. ЗМІСТ ПРОГРАМИ

Модуль I. „Загальні питання інформатики. Теорія алгоритмізації”

Конкретні цілі:

Студенти повинні ознайомитись та оволодіти такими поняттями, як інформація, інформаційні потоки, джерела інформації, інформаційні технології, системи, основними принципами та засобами передачі інформації; ознайомитись та усвідомити принцип дії, основні технічні та програмні засоби сучасної ЕОМ, їх функціональні схеми, етапи розвитку засобів обчислювальної техніки, напрямки використання ЕОМ в хімії та хімічному виробництві; теорією алгоритмізації, алгоритмічними мовами високого рівня; основними принципами моделей та навчитись будувати математичні моделі хімічних задач та реалізації на їх основі алгоритмів рішення.

Тема 1. Знайомство з предметом курсу та його основні задачі. Інформатика як наука. Структура ЕОМ та їх класифікація. Програмне забезпечення.

Знайомство з предметом курсу та його основні задачі. Інформатика як наука. Джерела інформації, інформаційні потоки, системи. Структура ЕОМ та їх класифікація. Програмне забезпечення ЕОМ. Історія розвитку засобів обчислювальної техніки. Особливості зберігання, переробки та графічного зображення інформації на ЕОМ.

Тема 2. Основні особливості використання ЕОМ. Математичні моделі хімічних процесів. Автоматизовані системи наукових досліджень (АСНД).

Основні особливості використання ЕОМ. Роль ЕОМ в розвитку суспільства. Використання ЕОМ в хімії. ЕОМ і хімічна технологія. Планування експерименту. Вивчення хімії з використанням ЕОМ. Математичні моделі хімічних процесів. Модель хімічної реакції (оптимізація складного хіміко-технологічного процесу за кінцевою концентрацією та температурою).

Тема 3. Алгоритмізація наукових дисциплін. Теорія алгоритмізації. Алгоритмічні мови високого рівня. Етапи рішення задач на ЕОМ.

Алгоритмізація наукових дисциплін – розробка математичних моделей. Теорія алгоритмів. Алгоритми рішення задач. Модельні задачі. Способи запису та типи алгоритмів. Властивості алгоритмів. Алгоритмічні мови та їх класифікація. Алгоритмічні роботи з величинами. Редагування програм. Обчислювальний експеримент. Надання результатів у вигляді таблиць та графіків. Етапи рішення задач на ЕОМ.

Модуль II. „Операційна система Windows. Пакети прикладних програм MS Office”

Конкретні цілі:

Студенти повинні ознайомитись та оволодіти основними навичками роботи на комп'ютері, основними можливостями операційної системи Windows, створювати, редагувати та формувати документи в середовищі програми Word for Windows, працювати з редактором формул, будувати діаграми; працювати з електронними таблицями в середовищі програми Excel for Windows; працювати з редактором для наукової графіки Origin, будувати графіки, обробляти експериментальні дані функціональними залежностями.

Тема 4. Операційна система Windows. Робочий стіл, головне меню, структура типового та діалогових вікон.

Операційна система Windows. основні поняття. Вбудовані додатки та утиліти. Робочий стіл Windows. Структура типового вікна. Діалогові вікна. Головне меню системи. Робота з довідковою системою. Налаштування інтерфейсу системи. Запуск на виконання додатків.

Тема 5. Операційна система Windows. Запуск програм на виконання, робота з довідниковою інформацією, пошук файлів, архівація файлів, антивірусні програми.

Запуск програм на виконання та їх завершення. Робота з довідковою системою. Пошук за різними критеріями файлів. Антивірусні програми. Забезпечення надійного зберігання інформації в ЕОМ.

Тема 6. Програма Explorer (Провідник).

Програма Explorer (Провідник). Робота з об'єктами: створення, переміщення, копіювання, перейменування. Пошук, знищення і відновлення об'єктів. Архівація файлів. Антивірусні програми.

Тема 7. Робота з текстовим редактором Word for Window.

Робота з текстовим редактором Word for Windows. Вікно редактора WORD: рядок заголовку, рядок меню, панель інструментів, вікно діалогу. Адаптація до вимог користувача. Виклик довідки WORD. Введення і редагування тексту: введення символів, переміщення за текстом, виділення тексту, редагування виділеного фрагменту, поля, пошук та заміна, перевірка орфографії. Форматування тексту: форматування символів, форматування абзаців, форматування сторінок, використання стилів. Створення і збереження документів. Перегляд і друкування документів. Вставка об'єктів та рисунків. Редактор формул.

Тема 8. Робота з електронними таблицями Excel for Windows.

Робота з електронними таблицями Excel for Windows. Вікно Excel: рядок заголовку, рядок меню, панель інструментів, вікно діалогу, рядок формул, рядок стану, довідкова система. Вікна книг. Робота з аркушами книг: заголовок вікна; перейменування листів; розподіл вікна; закріплення заголовків рядків і колонок; захист книг і листів. Створення і збереження файлів книг. Перегляд і друкування книг. Введення і редагування даних: типи даних; виділення та редагування фрагментів таблиць; форматування чарунок і діапазонів. Використання формул: посилання на чарунки; імена чарунок і діапазонів; арифметичні операції; функції; обчислення формул; використання *Майстра функцій*. Об'єкти. Побудова діаграм. Використання *Майстра діаграм*.

Тема 9. Робота з редактором програми для наукової графіки Origin (версії 3.5 та 4.1).

Робота з пакетом прикладної програми для наукової графіки ORIGIN. Вікна програми ORIGIN: робота у вікні таблиці даних (меню команд, підменю, панель інструментів); робота у вікні діаграми (меню команд, підменю, панель інструментів). Математична обробка результатів експериментів, що представлені на діаграмі. Здійснення математичних розрахунків у вікні таблиці даних. Робота у трьохвимірному просторі (3D графіка). Побудова просторових графіків.

Модуль III. „Програмування в середовищі BASIC”

Конкретні цілі:

Студенти повинні ознайомитись та оволодіти основними навичками програмування в середовищі алгоритмічної мови високого рівня Basic, працювати з пакетами прикладних програм, самостійно складати програми розрахунків.

Тема 10. Основні команди алгоритмічної мови Basic. Величини, масиви. Вирази: арифметичні, логічні, відношення, функції.

Програмування на мові програмування Basic. Основні команди алгоритмічної мови Basic. Величини, їх типи. Константи та змінні величини. Елементи масивів. Вирази: арифметичні, логічні, відношення, функції.

Тема 11. Оператори мови Basic: присвоювання, процедури, переходу, умовні оператори, циклу. Оператори введення–виведення. Програми і підпрограми.

Оператори мови Basic: присвоювання, процедури, переходу, умовні оператори, циклу. Оператори введення даних з клавіатури, з зовнішніх носіїв інформації, виведення інформації на екран, друкуючий пристрій, файл. Програми і підпрограми.

Модуль IV. „Регресійний аналіз експериментальних даних”

Конкретні цілі:

Студенти повинні ознайомитись та оволодіти основними поняттями регресійного аналізу, лінеаризацією нелінійних залежностей математичним шляхом, навичками обробки експериментальних даних методами згладжування, пошуку функціональної залежності між експериментальними величинами на основі методу найменших квадратів, давати характеристику щільності зв'язку.

Тема 12. Лінійна регресія. Лінеаризація нелінійних залежностей.

Регресивний аналіз. Лінійна регресія. Метод найменших квадратів (МНК). Визначення коефіцієнтів рівняння лінійної регресії. Середньоквадратичне відхилення. Лінеаризація нелінійних залежностей. Рівняння Арреніуса. Модельна задача.

Тема 13. Кореляція між параметрами хіміко-технологічних систем.

Кореляційний зв'язок між параметрами хіміко-технологічних систем. Діаграми розсіювання. Кореляційний та детерміністичний зв'язки. Якісні і кількісні методи визначення щільності зв'язку між експериментальними величинами.

Тема 14. Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних. Лінійне та нелінійне згладжування.

Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних для подальшого планування. Лінійне три-, п'ятиординатне та нелінійне згладжування. Вагові коефіцієнти. Переваги та недоліки використання методів згладжування.

Тема 15. Емпірична формула регресії. Вибір формули розрахунку. Метод найменших квадратів (МНК).

Емпірична формула регресії. Побудова емпіричної лінії залежності між експериментальними величинами. Вибір формули розрахунку. Адекватність рівняння регресії залежності між експериментальними величинами. Визначення відносної похибки прогнозування та коефіцієнта кореляційного відношення.

Модуль V. „Факторний аналіз”

Конкретні цілі:

Студенти повинні ознайомитись та оволодіти основними методами планування, оптимізації та прогнозування складних хіміко-технологічних процесів, будувати математичні моделі відповідних процесів, розраховувати основні кінетичні та термодинамічні характеристики хімічних процесів із використанням засобів обчислювальної техніки.

Тема 16. Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проекції. Контурно-графічний метод аналізу. Перевірка відтворюваності дослідів.

Факторний аналіз. Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проекції. Основні типи поверхонь проекцій відгуку. Контурно-графічний метод аналізу. Використання для пошуку оптимальних умов схем Берча та Клаймана. Модельна задача.

Тема 17. Дво-, трифакторний експеримент. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу.

Перевірка відтворюваності дослідів. Серія паралельних дослідів. Дисперсія відтворюваності дослідів. Дво-, трифакторний експеримент. Планування дослідів. Визначення мінімальної та достатньої кількості дослідів. Матриця планування. Кодовані змінні. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі. Модельна задача.

Тема 18. *Метод центрального композиційного планування (ОЦКП). Оптимізація з використанням методів крутого сходження.*

Метод центрального композиційного планування для складних хіміко-технологічних процесів. Визначення додаткових дослідів. Зоряне плече. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі. Оптимізація з використанням методів крутого сходження. Шаг оптимізації. Вибір найбільш вагомих впливаючих факторів. Ресурси оптимізації. Умови проведення оптимізації технологічних процесів.

Тема 19. *Симплексні методи в хімії. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів.*

Симплексні методи в хімії графічні та математичні. Симплекс. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів. Симплексні ґратки. Поверхня відгуку. Модельна задача.

Тема 20. *Оптимізація хіміко-технологічних процесів. Метод крутого сходження .*

Оптимізація хіміко-технологічних процесів: цільові функції, ресурси оптимізації. Пошук оптимальних умов проведення процесів методом крутого сходження на основі результатів факторного експерименту. Переваги і недоліки методу. Умови закінчення процесу оптимізації.

Тема 21. *Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Синтез амоніаку (модельна задача).*

Аналітичні методи оптимізації. Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Переваги і недоліки методу. Встановлення ефектів рівнів варіювання впливаючих факторів. Побудова графіків залежності і вибір оптимальних значень параметрів системи. Синтез амоніаку (комплексний метод планування та оптимізації хімічних процесів на основі вибору якісних та кількісних параметрів). Модельна задача.

Тема 22. *Векторний аналіз. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Термодинамічний аналіз хімічних реакцій.*

Векторний аналіз. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Залежні та незалежні рівняння хімічних систем. Пошук стехіометричних коефіцієнтів на базі основних та підлеглих рівнянь. Розрахунки термодинамічних параметрів хімічних систем (ступеня та константи дисоціації, енергії Гіббса та константи рівноваги на основі температурних залежностей). Модельна задача.

**Тематичний план лабораторних занять
з курсу “Обчислювальна техніка, основи програмування”**

№ п/п	Назва лабораторної роботи	Кількість годин	Література
	Модуль I „Загальні питання інформатики. Теорія алгоритмізації”		
1	Структура та програмне забезпечення ЕОМ. Алгоритмізація розрахункових процесів	4	1–8,18
	Модуль II „Операційна система Windows. Пакети прикладних програм MS Office”		
2	Операційна система Windows	6	13–15,18
3	Програма Explorer (Провідник) Windows	6	13–15,18
4	Текстовий редактор WORD для Windows. Використання графічного редактора Microsoft Graph 5.0	4	11,16–18
5	Табличний процесор Microsoft Excel для Windows	6	16,18
6	Робота з пакетом прикладної програми для наукової графіки Origin	6	18
	Модуль III „Програмування в середовищі BASIC”		
7	Робота з пакетами прикладних програм на мові Basic. Оптимізація складного хіміко-технологічного процесу (модель хімічної реакції)	6	12,14,18
8	Робота з пакетами прикладних програм на мові Basic. Інтерполяція даних методом Ньютона. Рішення системи лінійних рівнянь методом Гауса	6	12,14,18
	Модуль IV „Регресійний аналіз експериментальних даних”		
9	Лінійна регресія. Кореляційний зв'язок між величинами (Basic)	4	4,6,9,18
10	Лінеаризація нелінійних залежностей. Залежності константи швидкості хімічної реакції від температури $k=f(T)$ (рівняння Арреніуса) (Basic)	4	4,6,9,18
11	Обробка експериментальних даних методами простого та лінійного згладжування. Їх порівняльна характеристика (Basic)	4	4,6,9,18
	Модуль V „Факторний аналіз”		
12	Перевірка відтворюваності дослідів (Basic, Excel)	4	3,5,10,18
13	Використання методів повного факторного експерименту при плануванні складного хіміко-технологічного процесу (Basic, Excel)	4	3,5,10,18
14	Використання симплексних методів і контурно-графічного аналізу при плануванні хіміко-технологічного процесу (Basic)	4	3,5,10,18
15	Оптимізація хіміко-технологічних процесів з використанням методу ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП) (Excel)	4	3,5,10,18
16	Термодинамічний аналіз перебігу хімічних реакцій (Excel)	4	3,5,10,18

**Зміст самостійної та індивідуальної роботи
з курсу “Інформатика, обчислювальні машини, програмування”**

№ модуля	Зміст	Кількість годин	Література
Модуль II. „Операційна система Windows-9x. Пакети прикладних програм MS Office”	<i>Робота в Microsoft Word.</i> Автоматичне форматування. Створення загальнодоступних документів. Спеціальні можливості в Microsoft Word. Створення документів за допомогою шаблонів: створення документів; створення листа; створення резюме. Основи роботи з документами: настройка сторінок; колонкитули; введення тексту та малюнків; копіювання та вставка; форматування тексту; перевірка орфографії та граматики; пошук та заміна; маркування та нумерація; робота з таблицями; сортування списків та таблиць; багатоклончатий режим; підрахунок статистики документу. Перегляд документів та переміщення по документах: режими перегляду документів Microsoft Word; вибір режимів перегляду; перегляд двох частин документу одночасно; масштабування документу; відображення та приховування елементів форматування. Управління та друк файлів: відкриття та збереження документів; робота з файлами та папками; пошук файлів; властивості файлів; друк файлів. Робота з електронними та веб-документами: створення веб-сторінок; використання тем; створення гіперпосилань; пошук та перегляд веб-сторінок. Робота з графічними об'єктами: малюнки в Microsoft Word; розміщення графіків та тексту; зміна варіантів вставки графічних об'єктів; додавання тексту до графічного об'єкту або малюнку; зміна розташування – орієнтації графічного об'єкту на сторінці; перегляд графічних об'єктів та їх редагування. Робота з об'єктами Word-Art: додавання об'єкту Word-Art; зміна тексту; створення малюнків; розподіл графічних об'єктів. Робота з діаграмами: створення діаграми із таблиці Microsoft Word; панель інструментів, типи діаграм; створення зв'язаної або вкоріненої діаграми. Використання редактору формул: вставка формул; панель інструментів; зміна формул. <i>Робота в Microsoft Excel.</i> Настройка Microsoft Excel: настройка елементів вікна програми; зміна значень по замовчанню; настройка панелі інструментів та елементів	68	[11,13–18]

	меню; настройка параметрів запуску Microsoft Excel. Робота з книгами та листами: управління листами; розміщення вікон та перегляд листів. Робота з даними на листах: введення та вибір даних; редагування даних на листі; використання буферу обміну; форматування листів; перевірка записів у комірках (чарунках). Аналіз даних в Microsoft Excel: створення об'єднаних даних на листах та таблицях; аналіз даних з використанням об'єднаних таблиць. Створення та редагування формул: оператори; створення та знищення формул; функції; переміщення та копіювання формул. Використання посилань: посилання на комірки (чарунки) та діапазон комірок; перетворення типів посилань між комірками з відносною на абсолютну. Формули масивів. Робота з графічними об'єктами: малюнки та діаграми. Створення діаграми із таблиці Microsoft Excel, їх редагування та форматування.		
Модуль IV. „Регресійний аналіз експеримента льних даних”	<i>Робота з програмою Microsoft Graph.</i> Створення діаграми із таблиці Microsoft Word та Microsoft Excel. Панель інструментів (таблиці даних та діаграми), створення зв'язаної або вкоріненої діаграми; заповнення даними таблиці та їх редагування; типи діаграм; зміна типу діаграми; створення власних типів діаграм; зміна параметрів відображення діаграм; додавання тексту. Розробка та апробація програми рішення задач по темі „Лінійна регресія. Кореляційних зв'язок між величинами” в середовищі програми Microsoft Excel (завдання до лабораторної роботи №9). Розробка та апробація програми рішення задач по темі „Лінеаризація нелінійних залежностей. Залежності константи швидкості хімічної реакції від температури $k=f(T)$ (рівняння Арреніуса)” в середовищі програми Microsoft Excel (завдання до лабораторної роботи №10).	40	[4,6,9,14,15]
Модуль V. „Факторний аналіз”	Розробка та апробація програми рішення задач по темі „Перевірка відтворюваності дослідів” в середовищі програми Microsoft Excel (завдання до лабораторної роботи №12). Розробка та апробація програми на мові високого рівня Basic по темі „Термодинамічний аналіз перебігу хімічних реакцій” (завдання до лабораторної роботи №16).	28	[3,5,10,18]

4. ФОРМИ КОНТРОЛЮ

Схема системи оцінки знань студентів з курсу “Обчислювальна техніка, основи програмування”

1-й семестр

Модулі дисципліни. Вид роботи	Лабораторні заняття	Загальна кількість балів
Модуль I Лабораторна робота №1	30	30
Модуль II Лабораторна робота №2 Лабораторна робота №3 Лабораторна робота №4 Лабораторна робота №5 Лабораторна робота №6	30 30 30 30 30	150
Модуль III Лабораторна робота №7 Лабораторна робота №8	30 30	60
Лекційна контрольна робота	100	100
<i>Всього за 1-й семестр:</i>		340

2-й семестр

Модуль IV Лабораторна робота №9 Лабораторна робота №10 Лабораторна робота №11	30 30 30	90
Модуль V Лабораторна робота №12 Лабораторна робота №13 Лабораторна робота №14 Лабораторна робота №15 Лабораторна робота №16	30 30 30 30 30	150
Лекційна контрольна робота	100	100
<i>Всього за 2-й семестр:</i>		340

Кількість балів, яку набрав студент з курсу “Інформатика, обчислювальні машини, програмування”, визначається як середнє арифметичне кількості балів з відповідних модулів дисципліни. Загальна кількість балів складає 100% (340 рейтингових балів за семестр). Переведення кількості набраних балів в оцінку здійснюється згідно схеми:

Оцінка у відсотках від максимальної кількості балів	Оцінка за розширеною національною шкалою	Еквівалент оцінки за п’ятибальною шкалою	Оцінка за шкалою ECTS
90-100	Відмінно	5	A
80-89	Дуже добре	4,5	B
65-79	Добре	4	C
55-64	Задовільно	3,5	D
50-54	Достатньо	3	E
35-49	Незадовільно	2	FX
1-34	Неприйнятно	1	F

За результатами контролю знань студентів, дозволяється виставлення екзаменаційної оцінки (без екзаменів) – «відмінно», «добре», та «задовільно» (D). Студент має право підвищити оцінку, складаючи екзамен.

Залік виставляється (без складання) у випадку набору кількості балів, що відповідає мінімальній оцінці «задовільно» (D).

Оцінки FX, F (“2”) виставляються студентам, яким не зараховано хоча б один модуль з дисципліни після завершення її вивчення.

Студенту з оцінкою FX дозволяється скласти підсумковий модульний контроль. У випадку повторного одержання ним незадовільної оцінки, студент має право на повторне складання підсумкового модульного контролю (заліку або екзамену) не більше 2-х разів, згідно затвердженого графіка.

Студенти, які одержали оцінку F по завершенню вивчення дисципліни (не виконали навчальну програму хоча б з одного модуля, або не набрали за поточну навчальну діяльність з модуля мінімальну кількість балів), повинні пройти повторне навчання за індивідуальним навчальним планом.

Список рекомендованої літератури

1. Власов В.К., Королев Л.Н., Сотников А.Н. Элементы информатики. –М.:Наука, 1988. – 317с.
2. Демидович Б.Ц., Марон И.А. Основы вычислительной техники. –М.:Наука, 1970. –664с.
3. Джонсон К. Чисельные методы в химии. –М.:Мир, 1983. –503 с.
4. Матвеев В.К. Чисельные методы в химии (Учебный курс на базе микро-ЭВМ в 4-х частях). М.:изд.МГУ, 1985-1987. –Ч.1-2.
5. Вернен Г., Шанон М. ЭВМ помогает химии. –Л.:Химия, 1990. –383с.
6. Калиткин Н.Н. Чисельные методы (Учебное пособие). –М.:Наука, 1978. –512с.
7. Эберт К., Эдэрэр Х. Компьютеры. Использование в химии. М.:Мир, 1988. –416с.
8. Барчій І.Є., Кохан О.П. Основні питання інформатики. Методичний посібник. –Ужгород, 1997. –35с.
9. Барчій І.Є. Регресійний аналіз. Моделювання хімічних процесів за допомогою методів регресійного аналізу. Методичний посібник. –Ужгород, 1996. –21с.
10. Барчій І.Є., Сабов М.Ю. Використання математичних методів в хімії та хімічній технології. Навчально-методичний посібник для студентів хімічного факультету. – Ужгород, 1997. –31с.
11. Барчій І.Є., Кохан О.П. Використання графічних редакторів при обробці експериментальних даних в хімії та хімічній технології. Частина 1: Графічний редактор Microsoft Graph 5.0. Методичні розробки для студентів хімічного факультету УжДУ. – Ужгород, 1998. –30с.
12. Король І.Ю., Горват П.П., Король І.І. Основи роботи на IBM PC. Навчально-методичний посібник. –Ужгород, 1997. –85с.
13. Фигурнов В.Э. IBM PC для пользователей. Изд. 6-е, перераб. и доп. –М.:ИНФРА-М, 1995. –432с.
14. Руденко В.А., Макачук О.М., Патланжоглу М.О. Практический курс информатики. К.:Фенікс, 1997. –304с.
15. Гукин Д. Оптимизация Windows. Руководство фирмы Microsoft. –С.-Петербург: ПИТЕР. 1995. –368с.
16. Бернс П.Дж., Николсон Дж.Р. Секреты Excel для Windows. –К.:Диалектика. 1996. –576с.
17. Мансфилд Р. Word for Windows для профессионалов. –К.:БЕК + –М.:ЭНТРОП, 1997. – 592с.
18. Барчій І.Є. Практичні та лабораторні заняття з курсу „Інформатика, обчислювальні машини, програмування”. Методичні вказівки для студентів хімічного факультету УжНУ. –Ужгород: УжНУ, 2005. –27с.

ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ДО ЗАЛІКУ

1. Джерела інформації, інформаційні потоки, системи.
2. Структура ЕОМ та їх класифікація.
3. Програмне забезпечення ЕОМ.
4. Історія розвитку засобів обчислювальної техніки.
5. Особливості зберігання, переробки та графічного зображення інформації на ЕОМ.
6. Використання ЕОМ в хімії та хімічній технології.
7. Залучення ЕОМ в хімічний експеримент. Автоматизовані системи наукових досліджень.
8. Алгоритми. Властивості алгоритмів.
9. Способи запису та типи алгоритмів.
10. Запис алгоритмів у вигляді графічної блок-схеми та правила її складання.
11. Способи запису та типи алгоритмів.
12. Алгоритмічні мови та їх класифікація.
13. Етапи рішення задач на ЕОМ.
14. Операційна система Windows. основні поняття. Робочий стіл Windows.
15. Вбудовані додатки та утиліти Windows.
16. Структура типового вікна Windows.
17. Діалогові вікна Windows.
18. Головне меню системи Windows.
19. Запуск програм на виконання та їх завершення.
20. Робота з довідковою системою. Пошук за різними критеріями файлів.
21. Антивірусні програми. Забезпечення надійного зберігання інформації в ЕОМ.
22. Програма Explorer (Провідник). Робота з об'єктами: створення, переміщення, копіювання, перейменування.
23. Пошук, знищення і відновлення об'єктів. Архівація файлів.
24. Робота з текстовим редактором Word for Windows. Вікно редактора WORD: рядок заголовку, рядок меню, панель інструментів, вікно діалогу.
25. Введення і редагування тексту: введення символів, переміщення за текстом, виділення тексту, редагування виділеного фрагменту, поля, пошук та заміна, перевірка орфографії.
26. Форматування тексту: форматування символів, форматування абзаців, форматування сторінок, використання стилів.
27. Створення і збереження документів. Перегляд і друкування документів.
28. Вставка об'єктів та рисунків. Редактор формул.
29. Робота з електронними таблицями Excel for Windows. Вікно Excel: рядок заголовку, рядок меню, панель інструментів, вікно діалогу, рядок формул, рядок стану, довідкова система.
30. Вікна книг. Робота з аркушами книг: заголовок вікна; перейменування листів; розподіл вікна; закріплення заголовків рядків і колонок; захист книг і листів. Створення і збереження файлів книг. Перегляд і друкування книг.
31. Введення і редагування даних: типи даних; виділення та редагування фрагментів таблиць; форматування чарунок і діапазонів.
32. Використання формул: посилання на чарунки; імена чарунок і діапазонів; арифметичні операції; функції; обчислення формул.
33. Об'єкти. Побудова діаграм в Excel for Windows.
34. Вікна програми ORIGIN: робота у вікні таблиці даних (меню команд, підменю, панель інструментів).
35. Вікна програми ORIGIN; робота у вікні діаграми (меню команд, підменю, панель інструментів).
36. Математична обробка результатів експериментів, що представлені на діаграмі.
37. Здійснення математичних розрахунків у вікні таблиці даних.

38. Програмування на мові програмування Basic. Величини, їх типи. Константи та змінні величини. Елементи масивів. Вирази: арифметичні, логічні, відношення, функції.
39. Основні команди алгоритмічної мови Basic.
40. Оператори мови Basic: присвоювання, процедури, переходу, умовні оператори, циклу. Оператори мови Basic: введення даних з клавіатури, з зовнішніх носіїв інформації, виведення інформації на екран, друкуючий пристрій, файл. Програми і підпрограми.
41. Регресивний аналіз. Лінійна регресія. Метод найменших квадратів (МНК). Визначення коефіцієнтів рівняння лінійної регресії. Середньоквадратичне відхилення.
42. Лінеаризація нелінійних залежностей. Рівняння Арреніуса.
43. Кореляційний зв'язок між параметрами хіміко-технологічних систем. Діаграми розсіювання. Кореляційний та детерміністичний зв'язки. Якісні і кількісні методи визначення щільності зв'язку між експериментальними величинами.
44. Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних для подальшого планування. Лінійне три- та п'ятиординатне та нелінійне згладжування. Переваги та недоліки використання методів згладжування.
45. Емпірична формула регресії. Побудова емпіричної лінії залежності між експериментальними величинами. Адекватність рівняння регресії залежності між експериментальними величинами. Визначення відносної похибки прогнозування та коефіцієнта кореляційного відношення.
46. Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проєкції. Основні типи поверхонь проєкцій відгуку.
47. Контурно-графічний метод аналізу. Використання для пошуку оптимальних умов схем Берча та Клаймана.
48. Перевірка відтворюваності дослідів. Серія паралельних дослідів. Дисперсія відтворюваності дослідів.
49. Дво-, трифакторний експеримент. Планування дослідів. Визначення мінімальної та достатньої кількості дослідів. Матриця планування. Кодовані змінні.
50. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі.
51. Метод центрального композиційного планування для складних хіміко-технологічних процесів. Визначення додаткових дослідів. Зоряне плече. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі.
52. Оптимізація з використанням методів крутого сходження. Крок оптимізації. Вибір найбільш вагомих впливаючих факторів. Ресурси оптимізації. Умови проведення оптимізації технологічних процесів.
53. Симплексні методи в хімії: графічні та математичні. Симплекс. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів. Симплексні ґратки. Поверхня відгуку.
54. Оптимізація хіміко-технологічних процесів: цільові функції, ресурси оптимізації. Пошук оптимальних умов проведення процесів методом крутого сходження на основі результатів факторного експерименту. Умови закінчення процесу оптимізації.
55. Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Встановлення ефектів рівнів варіювання впливаючих факторів. Побудова графіків залежності і вибір оптимальних значень параметрів системи.
56. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Залежні та незалежні рівняння хімічних систем.
57. Пошук стехіометричних коефіцієнтів на базі основних та підлеглих рівнянь.