

Робоча програма навчальної дисципліни *«Обчислювальна техніка і основи програмування»* для здобувачів першого рівня вищої освіти «бакалавр» галузі знань **10** Природничі науки зі спеціальності **101** Екологія.

Розробник: Шаркаді Маріанна Миколаївна, доцент, кандидат економічних наук, доцент кафедри кібернетики і прикладної математики ДВНЗ «УжНУ»
Барчій Ігор Євгенович, професор, зав. кафедри неорганічної хімії «УжНУ»

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри кібернетики і прикладної математики
Протокол № 12 від «5» червня 2023 р.

Завідувач кафедри  Павло МУЛЕСА

Схвалено науково-методичною комісією ННІХЕ

Протокол №10 від «26» червня 2023 р.

Голова науково-методичної комісії  Михайло СЛИВКА

© Шаркаді М.М. 2023 р.

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет 2023 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
«Обчислювальна техніка і основи програмування»

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 9 (5+4)	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 270 (150+120)	1-й	-
Кількість модулів – 5	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 4 / 4 самостійної роботи студена – 4 / 4	1-й, 2-й	-
	Лекції:	
	46 (26+20)	-
	Практичні (семінарські):	
	-	-
Вид підсумкового контролю: 1-й семестр – залік 2-й семестр – залік	Лабораторні:	
	88 (48+40)	-
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	136 (76+60)	-

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

На сучасному етапі курс «Обчислювальна техніка і основи 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 і 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 ПЕОМ, теорія алгоритмізації, програмування на мові Python, робота з файлами, пакетами офісних програм, хмарні технології, 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. 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. Основною базою його вивчення є знання, що були надані в загальноосвітній середній школі.

Мета: засвоєння теоретичних основ інформатики, програмування та роботи на сучасних ПЕОМ; 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 (*Python*); вміння застосування одержаних знань для рішення хіміко-технологічних задач з використанням комп'ютерів; отримання умінь щодо прийняття самостійних рішень.

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

Відповідно до освітньої програми, вивчення дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

загальні компетенції: ЗК 2. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій. ЗК 6. Здатність спілкуватися з представниками інших. ЗК 8. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні. ЗК 11. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт. ЗК 14. Здатність до вирішення проблем інноваційного характеру та пошуку альтернативних рішень у професійній діяльності.

фахові компетенції: ФК 19. Здатність до оцінки впливу процесів техногенезу на стан навколишнього середовища та виявлення екологічних ризиків, пов'язаних з виробничою діяльністю. ФК 24. Здатність до використання сучасних інформаційних ресурсів для екологічних досліджень. ФК 26. Здатність до опанування міжнародного та вітчизняного досвіду вирішення регіональних та транскордонних екологічних проблем. ФК 28. Здатність використовувати систему екологічної стандартизації, сертифікації та статистичного кодування.

3. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньої програми, вивчення навчальної дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування» повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Уміти проводити пошук інформації з використанням відповідних джерел для прийняття обґрунтованих рішень.	ПРН 8
Уміти застосовувати програмні засоби, ГІС-технології та ресурси Інтернету для інформаційного забезпечення екологічних досліджень.	ПРН 10
Уміти прогнозувати вплив технологічних процесів та виробництв на навколишнє середовище.	ПРН 11
Уміти доносити результати діяльності до професійної аудиторії та широкого загалу, робити презентації та повідомлення.	ПРН 14

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування» студент **повинен**

знати: основні теоретичні питання інформатики як науки, інформаційні потоки, структуру сучасних ПЕОМ, теорію алгоритмізації, програмування на мові Python, роботу з файлами, використання пакетів офісних програм, редактора програми для наукової графіки Origin, основні напрямки використання ПЕОМ в хімії та хімічній технології, регресійний аналіз, методи планування, моделювання та оптимізації хімічних процесів.

вміти: працювати на сучасних ЕОМ з використанням сучасних операційних систем, використовувати для роботи пакети прикладних програм, 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.

Очікувані результати навчання	Шифр ПРН
Уміти проводити пошук інформації з використанням відповідних джерел для прийняття обґрунтованих рішень.	ПРН 8
Уміти застосовувати програмні засоби, ГІС-технології та ресурси Інтернету для інформаційного забезпечення екологічних досліджень.	ПРН 10
Уміти прогнозувати вплив технологічних процесів та виробництв на навколишнє середовище.	ПРН 11
Уміти доносити результати діяльності до професійної аудиторії та широкого загалу, робити презентації та повідомлення.	ПРН 14

Вивчення нормативної дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування» потребує використання знань здобувачів з курсів математики, хімії, інформатики та програмування, які були набуті за програмами середньої школи.

4. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
- модульний контроль,
- підсумковий контроль.

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркоче та фронтальне стандартизоване усне опитування за основними питаннями теми заняття перед початком занять;
- експрес-опитування;
- перевірка виконання завдання по темі лабораторної роботи;
- перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форма модульного контролю: виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 50-бальною шкалою (100%) за кожний модуль.

Форма підсумкового семестрового контролю: залік. До контролю допускаються студенти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

Розподіл балів, які отримують здобувачі першого рівня вищої освіти (модуль 1)

Поточне оцінювання та самостійна робота							Модульна контрольна робота	Лабораторні роботи	Сума
T1-T9	L1	L2	L3	L4	L5	L6		180	180
–	30	30	30	30	30	30			
								100 %	100%

T1-T9 – теми лекцій, L1-L6 – лабораторні роботи

Розподіл балів, які отримують здобувачі першого рівня вищої освіти (модуль 2)

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Лабораторні роботи	Сума
T10-T13	L7	L8			
–	30	30	50	60	110
			50%	50%	100%

T10-T13 – теми лекцій, L7-L8 – лабораторні роботи

Розподіл балів, які отримують здобувачі першого рівня вищої освіти (модуль 3)

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Лабораторні роботи	Сума
T14-T16	L9	L10			
–	30	30		60	60
				100%	100%

T14-T16 – теми лекцій, L9-L10 – лабораторні роботи

Розподіл балів, які отримують здобувачі першого рівня вищої освіти (модуль 4)

Поточне оцінювання та самостійна робота						Модульна контрольна робота	Лабораторні роботи	Сума
T17–T23	L11	L12	L13	L14	L15	50	150	200
–	30	30	30	30	30			
						50%	50%	100%

T17-T23 – теми лекцій, L11-L15 – лабораторні роботи

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2		Модуль 3		Модуль 4	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття								
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)	6	180	2	60	2	60	5	150
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні								
Письмове тестування при тематичному оцінюванні								
Презентація		-						
Реферат		-						
Есе		-						
...		-						
Модульна контрольна робота			1	50			1	50
Разом	6	180	3	110	2	120	6	200
Разом (%)		100%		100%		100%		100%

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на поставлені питання у бланках завдань. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожну модульну контрольну роботу становить 50 (100%) балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною, 30 (60%) балів.

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування» здійснюється у виді заліку. Контроль проводиться в усній формі шляхом співбесіди.

Кількість балів, яку набрав здобувач з дисципліни «Обчислювальна техніка і основи програмування», визначається як середнє арифметичне кількості балів з відповідних модулів дисципліни. Загальна кількість балів складає 290 рейтингових балів (100%) за 1-ий семестр та 320 рейтингових балів (100%) за 2-ий семестр. Переведення кількості набраних балів в оцінку здійснюється згідно схеми:

Оцінка за	Оцінка	Оцінка за національною шкалою
-----------	--------	-------------------------------

100-бальною шкалою	ЄКТС	Іспит	Залік
90 – 100	A	Відмінно	Зараховано
82-89	B	Добре	
74-81	C		
64-73	D	Задовільно	
60-63	E		
35-59	FX	Незадовільно з можливістю повторного складання	незараховано з можливістю повторного складання
0-34	F	Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	незараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

За результатами контролю знань студентів, дозволяється виставлення семестрової оцінки (без здачі) – «відмінно», «добре», та «задовільно» (D). Студент має право підвищити оцінку, складаючи залік. 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 семестровий контроль. У випадку повторного одержання ним незадовільної оцінки, здобувач має право на повторне складання підсумкового модульного контролю (заліку) не більше 2-х разів, згідно затвердженого графіка.

Студенти, які отримали за результатами підсумкового контролю та після перездачі оцінку «незараховано» (0-34 балів, F), зобов'язані пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру за індивідуальним навчальним планом) і скласти залік.

Результати підсумкового контролю знань заносяться до залікової відомості.

Перезарахування результатів навчання, здобутих у неформальній освіті

Відповідно до чинного законодавства України та Положення про порядок визнання в ДВНЗ «Ужгородський національний університет» результатів навчання, здобутих у неформальній освіті (від 03 березня 2020 р., <https://www.uzhnu.edu.ua/uk/infocentre/get/22966>) здобувачі вищої освіти мають право на визнання результатів навчання, здобутих у неформальній освіті. Визнання таких результатів можливо тільки для навчальних дисциплін, які починають викладатися із другого семестру.

Визнання результатів навчання, здобутих у неформальній освіті, можливо якщо такі відповідають вимогам освітньої програми щодо формування запланованих компетентностей. Загалом за період навчання результати навчання в неформальній освіті можуть бути зараховані в обсязі не більше 10% загальної кількості кредитів ЄКТС, передбачених освітньою програмою.

Види неформальної освіти, результати яких можуть бути перезараховані: тематичні удосконалення, вебінари, курси, стажування, практики, тренінги, майстер-класи (ворк-шопи), організовані на платформах «Prometheus», «Coursera», закладів вищої освіти та офіційних провайдерів БПР, визнаних МОЗ України, участь у наукових форумах та конференціях, публікації у фахових наукових виданнях та виданнях, включених до наукометричних баз “Scopus” та “Web of Science”. Тематика вказаних заходів та активності повинна відповідати змісту робочої програми (тематичні плани лекцій та практичних/семінарських занять).

Процедура визнання результатів навчання, здобутих у неформальній освіті проводиться комісійно. Для цього здобувач вищої освіти не пізніше 30 календарних днів до завершення семестру (в якому вивчається навчальна дисципліна, щодо якої бажає провести перезарахування результатів навчання) подає до деканату факультету відповідну заяву та документи, які підтверджують факт отримання неформальної освіти (сертифікат, посвідчення, свідоцтво, освітні програми тощо). Відповідно до отриманої заяви деканат утворює предметну комісію у складі гаранта освітньої програми, завідувача відповідної

профільної кафедри та науково-педагогічних працівників, які викладають відповідну навчальну дисципліну. Комісія формує висновок щодо обсягів кредитів ЄКТС, можливих для перезарахування та надає його керівництву факультету та на профільну кафедру, відповідно до Положення про порядок визнання в ДВНЗ «Ужгородський національний університет» результатів навчання.

5. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «Обчислювальна техніка і основи програмування»

5.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль 1. «Загальні питання інформатики. Теорія алгоритмізації. Операційна система Windows. Пакети прикладних програм MS Office»

***Тема 1.** Знайомство з предметом курсу та його основні задачі. Поняття інформації, інформаційної та обчислювальної систем.*

Неперервна та дискретна інформація. Властивості, характерні риси, вимірювання інформації. Інформаційна та обчислювальна системи. Архітектура цифрового комп'ютера. Технологія виконання команд процесором. Абстрактні обчислювальні машини.

***Тема 2.** Програмне забезпечення ПЕОМ.*

Системне і прикладне програмне забезпечення. Операційна система. Сервісні та інструментальні системи. Системи програмування.

***Тема 3.** Вступ в алгоритмізацію.*

Поняття алгоритму. Властивості алгоритмів. Способи опису алгоритмів. Типи алгоритмів. Виконавець алгоритму. Формальне виконання алгоритму. Аргументи, результати, проміжні величини.

***Тема 4.** Поняття інформаційних технологій.*

Поняття інформації, інформаційної технології. Інтернет і веб: короткий історичний зріз. Класифікація та призначення ІТ.

***Тема 5.** Комп'ютерні засоби роботи з текстовою і графічною інформацією.*

Текстові редактори та їх класифікація. Обробка текстової інформації. Підготовка матеріалів у текстовому редакторі MS Word. Технологія візуалізації інформації на основі векторної і растрової графіки. Види графічних редакторів. Формати графічних файлів. Оформлення результатів роботи з використанням презентацій MS Power Point. On-line прикладне програмне забезпечення для створення та редагування наукових текстів.

***Тема 6.** Засоби інформаційних технологій структурування і організації даних. Обробка числової інформації.*

Методологія роботи з числовою інформацією: джерела походження чисел – спостереження, контроль, вимірювання; процес обробки числової інформації. Електронні таблиці. Можливості, принципи і основні прийоми роботи з електронними таблицями. Майстер функцій. Базові функції, функції дати, фінансові функції, логічні функції. Забезпечення якісного аналізу даних, пошук закономірностей. Графічний аналіз і представлення даних з використанням графіків і діаграм. Он-лайн прикладне програмне забезпечення для аналізу та візуалізації даних.

***Тема 7.** Мережеві технології в хімії та екології. Використання ресурсів Internet у професійній діяльності.*

Інформаційно-довідкові та інформаційно-пошукові системи. Технічні засоби реалізації інформаційних технологій: мережеві технології. Основні поняття комп'ютерних мереж. Класифікація комп'ютерних мереж. Роль комп'ютерних мереж в інформатизації хімічної галузі. Глобальна мережа Internet та її можливості. Основні послуги Internet. Загальні принципи пошуку даних в Internet. Сучасні напрямки використання комп'ютерних технологій в практичних задачах. Програмне забезпечення сучасних комунікаційних технологій. Принципи роботи та обміну інформацією за допомогою різних комунікаційних технологій. Структура електронного повідомлення, способи відправки та отримання. Комп'ютерна безпека. Комп'ютерні віруси та захист від них.

***Тема 8.** Хмарні інформаційні технології.*

Термінологія та історія хмарних технологій. Суть та характеристики хмарних технологій. Моделі хмарного розміщення та їх класифікація. Основи роботи з хмарними сервісами.

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 2. «Базові програмні структури мови Python»

Тема 10. Мова програмування. Поняття мови програмування.

Алфавіт, синтаксис, семантика. Огляд основних можливостей мови та встановлення Python.

Тема 11. Типи величин. Поняття величини і типу даних.

Типи даних в Python. Змінні та вирази у Python. Опис змінних. Оператор присвоювання. Перетворення типів. Арифметичні та логічні вирази.

Тема 12. Реалізація циклічних алгоритмів.

Оператор циклу while. Вкладені цикли. Оператори break, continue. Тип діапазон range. Цикл for.

Тема 13. Множини. Словники.

Опис множин. Операції над множинами. Опис словників. Операції над словниками.

Модуль 3. «Регресійний аналіз експериментальних даних»

Тема 14. 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 15. 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 16. Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних. Лінійне та нелінійне згладжування. Емпірична формула регресії. Вибір формули розрахунку. Метод найменших квадратів (МНК).

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. 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 4. «Факторний аналіз»

Тема 17. 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 18. 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 19. *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 20. *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 21. *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 22. *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 23. *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.

**5.2. Структура навчальної дисципліни
«Обчислювальна техніка і основи програмування»**

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: денна					
	Усього	у тому числі				
Лекції		практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота	
1-й семестр						
Модуль 1						
<i>Тема 1. Знайомство з предметом курсу та його основні задачі. Поняття інформації, інформаційної та обчислювальної систем. (2 години).</i>	7	2				5
<i>Тема 2. Програмне забезпечення ПЕОМ. (2 години).</i>	7	2				5
<i>Тема 3. Вступ в алгоритмізацію. (2 години).</i>	13	2		6		5
<i>Тема 4. Поняття інформаційних технологій. (2 годин).</i>	7	2				5
<i>Тема 5. Комп'ютерні засоби роботи з текстовою і графічною інформацією. (2 години).</i>	14	2		6		6
<i>Тема 6. Засоби інформаційних технологій структурування і організації даних. Обробка числової інформації. (2 години).</i>	14	2		6		6
<i>Тема 7. Мережеві технології в хімії та екології. Використання ресурсів Internet у професійній діяльності. (2 години).</i>	7	2				6
<i>Тема 8. Хмарні інформаційні технології. (2 години).</i>	14	2		6		6
<i>Тема 9. Робота з редактором програми для наукової графіки Origin (версії 3.5 та 4.1) (2 години).</i>	14	2		6		6
Разом за модуль	104	18		36		50
Модуль 2						
<i>Тема 10. Мова програмування Python. Поняття мови програмування. (2 години).</i>	9	2				7
<i>Тема 11. Типи величин. Поняття величини і типу даних. (2 години).</i>	15	2		6		7
<i>Тема 12. Реалізація циклічних алгоритмі. (2 години).</i>	8	2				6
<i>Тема 13. Множини. Словники. (2 години).</i>	14	2		6		6
Разом за модуль	46	8		12		26
<i>Семестрова контрольна робота</i>						
Разом за семестр	150	26		48		76
2-й семестр						
Модуль 3						
<i>Тема 14. Лінійна регресія. Лінеаризація нелінійних</i>	8	2				6

<i>залежностей (2 години).</i>						
Тема 15. Кореляція між параметрами хіміко-технологічних систем (2 години).	14	2		6		6
Тема 16. Згладжування експериментальних даних при одержанні вихідного модуля даних. Лінійне та нелінійне згладжування. Емпірична формула регресії. Вибір формули розрахунку. Метод найменших квадратів (МНК) (2 години).	14	2		6		6
Разом за модуль	36	6		12		18
Модуль 4						
Тема 17. Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проєкції. Контурно-графічний метод аналізу. Перевірка відтворюваності дослідів (2 години).	14	2		6		6
Тема 18. Дво-, трифакторний експеримент. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу (2 години).	14	2		6		6
Тема 19. Метод центрального композиційного планування (ОЦКП). Оптимізація з використанням методів крутого сходження (2 години).	8	2				6
Тема 20. Симплексні методи в хімії. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів (2 години).	8	2				6
Тема 21. Оптимізація хіміко-технологічних процесів. Метод крутого сходження (2 години).	14	2		6		6
Тема 22. Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Синтез амоніаку (модельна задача) (2 години).	14	2		6		6
Тема 23. Векторний аналіз. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Термодинамічний аналіз хімічних реакцій (2 години).	12	2		4		6
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	84	14		28		42
Разом за семестр	120	20		40		60
Всього за навчальний рік	270	46		88		136

5.3. Тематичний план лабораторних занять
з курсу «Обчислювальна техніка і основи програмування»

№ п/п	Назва лабораторної роботи	Кількість годин	Література
	1-й семестр		
	Модуль 1 «Загальні питання інформатики. Теорія алгоритмізації. Операційна система Windows. Пакети прикладних програм MS Office»		
1	Структура та програмне забезпечення ПЕОМ. Алгоритмізація розрахункових процесів	6	1–5
2	Поняття інформації, інформаційної технології. Класифікація та призначення ІТ.	6	1–5
3	Комп'ютерні засоби роботи з текстовою і графічною інформацією	6	1–5, 7
4	Засоби інформаційних технологій структурування і організації даних. Обробка числової інформації.	6	13
5	Мережеві технології в хімії та екології. Використання ресурсів Internet у професійній діяльності.	6	6, 9
6	Робота з пакетом прикладної програми для наукової графіки Origin	6	12, 14
	Модуль 2 «Програмування в середовищі BASIC»		
7	Програмування на мові Python. Оптимізація складного хіміко-технологічного процесу (модель хімічної реакції)	6	11-14
8	Програмування на мові Python. Інтерполяція даних методом Ньютона. Рішення системи лінійних рівнянь методом Гауса	6	11-14
	2-й семестр		
	Модуль 3 «Регресійний аналіз експериментальних даних»		
9	Лінійна регресія. Кореляційний зв'язок між величинами (Basic). Лінеаризація нелінійних залежностей. Залежності константи швидкості хімічної реакції від температури $k=f(T)$ (рівняння Арреніуса) (Basic)	6	5, 11-14
10	Обробка експериментальних даних методами простого та лінійного згладжування. Їх порівняльна характеристика (Basic)	6	5, 11-14
11	Модуль 4 «Факторний аналіз»		
	Перевірка відтворюваності дослідів (Basic, Excel)	6	5,11-14
12	Використання методів повного факторного експерименту при плануванні складного хіміко-технологічного процесу (Basic, Excel)	6	5, 11-14
13	Використання симплексних методів і контурно-графічного аналізу при плануванні хіміко-технологічного процесу (Basic)	6	5, 11-14
14	Оптимізація хіміко-технологічних процесів з використанням методу ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП) (Excel)	6	5,11-14
15	Термодинамічний аналіз перебігу хімічних реакцій (Excel)	4	5, 11-14
	Всього:	88	

	<p>меню; настройка параметрів запуску Microsoft Excel. Робота з книгами та листами: управління листами; розміщення вікон та перегляд листів.</p> <p>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 відносної на абсолютну. Формули масивів.</p> <p>Робота з графічними об'єктами: малюнки та діаграми. Створення діаграми із таблиці Microsoft Excel, їх редагування та форматування.</p>		
Модуль 3.	<p><i>Робота з програмою Microsoft Graph.</i></p> <p>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.</p> <p>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).</p>	36	[6–9,11–14]
Модуль 4	<p>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).</p>		

5.5. Перелік питань для підготовки

1. Джерела інформації, інформаційні потоки, системи.
2. Структура ПЕОМ та їх класифікація.
3. Програмне забезпечення ПЕОМ.
4. Історія розвитку засобів обчислювальної техніки.
5. Особливості зберігання, переробки та графічного зображення інформації на ЕОМ.
6. Використання ПЕОМ в хімії та хімічній технології.
7. Залучення ПЕОМ 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 ПЕОМ.
14. Операційні системи. Основні поняття.
15. Антивірусні програми. Забезпечення надійного зберігання інформації в ПЕОМ.
16. Пошук, знищення і відновлення об'єктів. Архівація файлів.
17. Робота з текстовим редактором.
18. Введення і редагування тексту: введення символів, переміщення за текстом, виділення тексту, редагування виділеного фрагменту, поля, пошук та заміна, перевірка орфографії.
19. Форматування тексту: форматування символів, форматування абзаців, форматування сторінок, використання стилів.
20. Створення і збереження документів. Перегляд і друкування документів.
21. Вставка об'єктів та рисунків. Редактор формул.
22. Робота з електронними таблицями. Рядок заголовку, рядок меню, панель інструментів, вікно діалогу, рядок формул, рядок стану, довідкова система.
23. 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.
24. Введення і редагування даних: типи даних; виділення та редагування фрагментів таблиць; форматування чарунок і діапазонів.
25. Використання формул: посилання на чарунки; імена чарунок і діапазонів; арифметичні операції; функції; обчислення формул.
26. Об'єкти. Побудова діаграм.
27. Вікна програми ORIGIN: робота у вікні таблиці даних (меню команд, підменю, панель інструментів).
28. Вікна програми ORIGIN; робота у вікні діаграми (меню команд, підменю, панель інструментів).
29. Математична обробка результатів експериментів, що представлені на діаграмі.
30. Здійснення математичних розрахунків у вікні таблиці даних.
31. Програмування на мові програмування Python. Величини, їх типи. Константи та змінні величини. Елементи масивів. Вирази: арифметичні, логічні, відношення, функції.
32. Основні команди мови Python.
33. Оператори мови Python: присвоювання, процедури, переходу, умовні оператори, циклу. Оператори мови Python: введення даних з клавіатури, з зовнішніх носіїв інформації, виведення інформації на екран, друкуючий пристрій, файл. Програми і підпрограми.
34. Регресивний аналіз. Лінійна регресія. Метод найменших квадратів (МНК). Визначення коефіцієнтів рівняння лінійної регресії. Середньоквадратичне відхилення.
35. Лінеаризація нелінійних залежностей. Рівняння Арреніуса.

36. 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.
37. 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.
38. 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.
39. Фактори, що впливають на хімічну систему та їх функції відгуку. Поверхні відгуку та їх ортогональні проєкції. Основні типи поверхонь проєкцій відгуку.
40. Контурно-графічний метод аналізу. Використання для пошуку оптимальних умов схем Берча та Клаймана.
41. Перевірка відтворюваності дослідів. Серія паралельних дослідів. Дисперсія відтворюваності дослідів.
42. Дво-, трифакторний експеримент. Планування дослідів. Визначення мінімальної та достатньої кількості дослідів. Матриця планування. Кодовані змінні.
43. Планування та оптимізація хімічних процесів за допомогою методів факторного аналізу. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі.
44. Метод центрального композиційного планування для складних хіміко-технологічних процесів. Визначення додаткових дослідів. Зоряне плече. Перевірка значимості коефіцієнтів регресії. Перевірка адекватності математичної моделі.
45. Оптимізація з використанням методів крутого сходження. Крок оптимізації. Вибір найбільш вагомих впливаючих факторів. Ресурси оптимізації. Умови проведення оптимізації технологічних процесів.
46. Симплексні методи в хімії: графічні та математичні. Симплекс. Побудова поверхонь відгуку з використанням симплексних методів. Симплексні ґратки. Поверхня відгуку.
47. 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.
48. Метод ортогональних латинських квадратів та прямокутників (ОЛКП). Встановлення ефектів рівнів варіювання впливаючих факторів. Побудова графіків залежності і вибір оптимальних значень параметрів системи.
49. Вивчення кінетики стехіометричних процесів. Матриці вихідних компонентів та кінцевих продуктів реакції. Залежні та незалежні рівняння хімічних систем.
50. Пошук стехіометричних коефіцієнтів на базі основних та підлеглих рівнянь.

6. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Технічні засоби: Мультимедійний проектор.

Обладнання: персональні комп'ютери, ноутбуки.

Програмне забезпечення: операційна система, пакет Microsoft Office, бібліотеки та середовище програмування Python, Origin Lab.

7. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

1. Караванова Т.П. Методи побудови алгоритмів та їх аналіз. Обчислювальні алгоритми (навчальний посібник). *Київ: Генеза, 2009.*
2. Макарова М.В., Карнаухова Г.В., Запара С.В. Інформатика та комп'ютерна техніка: Навч.посібник. *Суми: Університ. книга, 2003*
3. Клименко О.Ф., Головка Н.Р., Шарапов О.Д. Інформатика та комп'ютерна техніка: Навч.-метод. посібник. *Київ:КНЕУ, 2002*
4. Баженов В.А. та ін. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології. Підручник. *Київ: Каравела, 2003.*
5. О.Томашевський, Г.Цегелик, М.Вітер, В.Дубук. Інформаційні технології та моделювання бізнес-процесів. *Київ: Центр навчальної літератури. 2012.*
6. Віткул М., Петренко В.. Microsoft Office в прикладах і завданнях з методикою їх розв'язання. *Київ: Арістей, 2007.*
7. Левченко О. Культура роботи з текстовими документами. *Київ: Навчальна книга – Богдан. 2018.*
8. Левченко О.М. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології: Підручник. 2-ге вид. *Київ: Каравела, 2007.*
9. J. Parsons. New Perspectives on Microsoft Excel 2013, Comprehensive. *Cengage Learning 2013,*
10. Чаповська Р.Б., Вальдрат О.Л. Робота з MS EXCEL. Навчальний посібник. *Київ: ЦУЛ, Фітосоціоцентр, 2002.*
11. Барчій І.Є. Регресійний аналіз. Моделювання хімічних процесів за допомогою методів регресійного аналізу. Методичний посібник. *Ужгород, 1996.*
12. Барчій І.Є., Сабов М.Ю. Використання математичних методів в хімії та хімічній технології. Навчально-методичний посібник для студентів хімічного факультету. *Ужгород, 1997.*
13. 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.*
14. Барчій І.Є. Практичні та лабораторні заняття з курсу „Інформатика, обчислювальні машини, програмування”. Методичні вказівки для студентів хімічного факультету УжНУ. *Ужгород: УжНУ, 2005.*
15. The Python Tutorial [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://docs.python.org/3/tutorial/index.html>.
16. Костюченко А.О. Основи програмування мовою Python: навчальний посібник. Чернігів: ФОП Балакіна С.М., 2020. 180 с.
17. Баженов В. А. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології: Підручник/В.
18. А. Баженов, П. С. Венгерський, В. С. Гарвона / Наук. ред. Г. А. Шинкаренко, О. В. Шишов. – К. : Каравела, 2016. – 592 с.
19. Бережна О. Б. Інформатика та комп'ютерна техніка. 1 частина : Навч. посіб. / О. Б. Бережна. – Х. : ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2017. – 164 с.
20. Сіньков О. С. Cloud Computing в освітньому процесі. Навчально-методичний посібник. – Кам'янець-Подільський, 2019. – 83 с.
21. Хмарні та Грід-технології: конспект лекцій / В. Я. Юрчишин. – Київ: КПІ ім. Сікорського, 2019. – 264 с.