

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна

Должность: проректор по учебной работе

Дата подписания: 25.03.2016 13:48:07

Уникальный программный ключ:

0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e943df4a4851fda56d089

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии



КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУКЕ И ОБРАЗОВАНИИ

Методические указания
по выполнению практических работ для студентов
направления подготовки 04.04.01 (020100.68) Химия

Курск 2015

УДК 004.9

Составитель: А.В. Сазонова, Е.В. Агеева

Рецензент

Доктор химических наук, профессор *Л.М. Миронович*

Компьютерные технологии в науке и образовании: методические указания по выполнению практических работ / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Сазонова, Е.В. Агеева. Курск, 2015, 32 с.: ил. , табл. 4. Библиогр.: 32 с.

Методические указания по выполнению практических работ содержат основные теоретические положения к практическим занятиям по дисциплине «Компьютерные технологии в науке и образовании», а также порядок их выполнения. Приведены вопросы для самоконтроля, а также домашнее задание.

Методические указания предназначены для студентов направления подготовки 04.04.01 (020100.68) Химия.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать Форма 60x84 1/16.
Усл. печ. л. Уч.-изд.л. Тираж 100 экз. Заказ. Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Содержание

Практическая работа №1 «Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации»	4
Вопросы для самоконтроля	11
Практическая работа №2 «Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений»	11
Вопросы для самоконтроля	19
Практическая работа №3 «Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований»	20
Домашнее задание	27
Вопросы для самоконтроля	28
Практическая работа №4 «Персональный компьютер и программное обеспечение спектрофотометра ПЭ-5400УФ»	28
Вопросы для самоконтроля	31
Список использованных источников	32

Практическая работа №1
**«Использование сети Интернет для поиска
учебной и научной информации»**

Цель работы: используя поисковые системы российского сегмента сети Интернет, Международные поисковые системы, Российские каталоги интернет-ресурсов общего назначения, каталоги ресурсов для образования, а также специализированные химические сайты освоить поиск учебной и научной информации

Теоретические основы

Электронные ресурсы, опубликованные в компьютерной сети Интернет, сегодня используются практически во всех сферах деятельности человека. С их помощью повышается эффективность работы инженеров и врачей, юристов и военных, экономистов и деятелей культуры. Современные телекоммуникационные технологии и электронные ресурсы не обошли стороной и образование.

Для обеспечения эффективного поиска информации в компьютерных сетях применяются технологии поиска информации, цель которых - собирать данные об информационных ресурсах сети и предоставлять пользователям возможность быстрого поиска информации. С помощью поисковых систем в сети Интернет можно искать и находить электронные ресурсы, программное обеспечение, информацию об организациях, людях и многое другое.

Поисковые системы (или, говоря иначе, поисковые серверы) достаточно многочисленны и разнообразны. Различают **поисковые индексы и каталоги**.

Поисковые индексы регулярно прочитывают («индексируют») содержание большинства страниц сети Интернет и помещают их полностью или частично в общую базу данных. Пользователи поискового сервера имеют возможность осуществлять полнотекстовый поиск по этой базе данных, используя ключевые слова, относящиеся к интересующей их теме. Выдача результатов поиска обычно состоит из выдержек рекомендуемых вниманию пользователя страниц и их адресов, оформленных в виде гиперссылок. Работать с поисковыми серверами этого типа удобно, когда человек хорошо представляет то, что именно хочет найти.

Поисковые каталоги представляют собой многоуровневую смысловую классификацию ссылок, построенную по принципу «от

общего к частному». Примером такого каталога, напечатанного на бумаге, являются все выпуски настоящего издания. В поисковых каталогах сети Интернет ссылки чаще всего сопровождаются кратким описанием информационного ресурса. Как правило, возможен поиск в названиях рубрик (категориях) и описаниях ресурсов по ключевым словам. Поисковыми каталогами пользуются тогда, когда не вполне четко знают, что именно ищут. Переходя от самых общих категорий к более частным, можно определить, с каким именно электронным ресурсом сети Интернет следует ознакомиться более детально.

Поисковые каталоги подразделяются на каталоги общего назначения и специализированные. Поисковые каталоги общего назначения включают в себя информационные ресурсы самого разного профиля. Специализированные каталоги объединяют только ресурсы, посвященные определенной тематике. Им часто удается достичь лучшего охвата электронных ресурсов из конкретной области и построить более адекватную рубрикацию.

Работать с поисковыми системами несложно. В строке запроса поисковой системы необходимо набирать на нужном языке ключевые слова или фразу, соответствующие электронному ресурсу или ресурсам сети Интернет, которые требуется найти. Затем с помощью мыши необходимо нажать на экране кнопку с английской надписью «Search» или русской надписью «Поиск». Результаты поиска появятся в рабочем окне обозревателя.

Как правило, поисковая система выдает результаты поиска порциями, например, по 10 ссылок на одной странице. Поэтому часто все результаты поиска занимают более одной страницы. В этом случае под списком рекомендуемых ссылок будет находиться ссылка, предлагающая перейти к следующей «порции» результатов поиска.

В идеальном случае требуемый электронный ресурс будет помещен поисковой системой на первую страницу выдачи результатов поиска. Такой ресурс можно сразу узнать по его краткому описанию. Однако часто приходится просмотреть несколько ресурсов и страниц выдачи результата, прежде чем удастся обнару-

жить подходящий электронный ресурс. Как правило, пользователь просматривает такие ресурсы в новых окнах обозревателя, не закрывая окно обозревателя с результатами поиска.

Ключевые слова, составляющие поисковый запрос, обычно разделяются пробелами. Различные поисковые системы воспринимают это по-разному.

Некоторые из них отбирают по такому запросу только электронные ресурсы, содержащие все ключевые слова, то есть воспринимают пробел в запросе как логическую связку «и». Некоторые трактуют пробел как логическое «или» и производят поиск ресурсов, содержащих хотя бы одно из приведенных в запросе ключевых слов.

Удачно сформулировать запрос для поисковой системы с первого раза получается не всегда. Если запрос короткий и в нем присутствуют только часто употребляемые слова, может быть найдено очень много ресурсов: сотни тысяч или миллионы. И наоборот, если запрос окажется слишком детализированным или в нем будут использованы очень редкие слова, поисковая система выдаст сообщение о том, что ресурсов, отвечающих такому запросу, не найдено. Постепенное сужение или расширение круга поиска через увеличение или уменьшение списка ключевых слов, замена неудачных поисковых терминов на более удачные помогают улучшить результаты поиска.

Весьма полезным может оказаться использование возможностей режима «Расширенный поиск» (Advanced Search), который имеется в большинстве поисковых систем. В данном режиме можно задать дополнительные условия, ограничивающие область поиска: например, выполнить поиск документов, находящихся на заданном сайте (сайтах), опубликованных в Интернете в определенный период времени, имеющих заданный формат (html, doc, pdf и др.), расположенных на сайтах заданного региона, а также задать логические правила обработки запроса - поиск результатов с точным совпадением с контекстом запроса, с любым из заданных слов, со всеми словами, без заданных слов и т. д.

С помощью современных поисковых систем можно проводить поиск самых разных электронных ресурсов сети Интернет, использование которых позволило бы повысить эффективность

общего среднего образования. Среди таких ресурсов можно выделить образовательные интернет-порталы, которые сами являются каталогами ресурсов, сервисные и инструментальные компьютерные программные средства, электронные представления бумажных изданий, электронные учебные средства и средства измерения результатов обучения, ресурсы, содержащие новости, объявления и средства для общения участников образовательного процесса.

Специализированные химические сайты могут оказаться полезными как при изложении нового материала, так и для проведения лабораторно-практических работ на уроках по неорганической и органической химии. Благодаря таким ресурсам становятся возможными знакомство школьников с химическими веществами и демонстрация опытов, которые по разным причинам недоступны для школы. В числе приводимых интернет-ресурсов - электронные учебники и учебные пособия по химии, электронные издания, посвященные занимательной и популярной химии, химические каталоги, таблицы и базы данных, атласы и коллекции материалов, призванные повысить наглядность и доступность содержания химии как учебной дисциплины.

Современный специалист не сможет эффективно организовать и осуществлять свою деятельность без использования сети Интернет, ее ресурсов и сервисов. Однако процесс освоения таких средств информационных технологий не может быть осуществлен в кратчайшие сроки. Необходимо решение большого количества проблем, начиная с ознакомления с техническими и технологическими особенностями работы с техникой и заканчивая проблемой выработки устойчивой профессиональной заинтересованности в обучении и науке с использованием современных средств информатизации образования.

Практическое задание

1 Выполнить индивидуальное задание, представленное в таблице 1, используя представленные ниже перечень тем, а также списки поисковых систем, каталогов и специализированных химических сайтов. Освоить поиск учебной и научной информации.

Таблица 1 - Индивидуальное задание

№ варианта	№ темы (вопросы для самоконтроля)	№ поисковой системы российского сегмента сети Интернет	№ Международной поисковой системы	№ Российского каталога интернет-ресурсов общего назначения	№ каталога ресурсов для образования	№ специализированных химических сайтов
1	1, 11, 21, 31, 41,	1	1	1	1	1, 11, 21
2	2, 12, 22, 32, 42	2	2	2	2	2, 12, 22
3	3, 13, 23, 33, 43	3	3	3	3	3, 13, 23,
4	4, 14, 24, 34, 44	4	4	4	4	4, 14, 24
5	5, 15, 25, 35, 45	5	1	5	5	5, 15, 25
6	6, 16, 26, 36, 46	1	2	1	1	6, 16, 26
7	7, 17, 27, 37, 47	2	3	2	2	7, 17, 27
8	8, 18, 28, 38, 48	3	4	3	3	8, 18, 28
9	9, 19, 29, 39, 49	4	1	4	4	9, 19, 29
10	10, 20, 30, 40, 50	5	2	5	5	10, 20, 30

2 Сделать выводы о наиболее эффективном и качественном средстве поиска учебной и научной информации в сети Интернет.

Поисковые системы российского сегмента сети Интернет:

1 Поисковая система «Яндекс» <http://www.yandex.ru>

2 Поисковая систем Google (Россия) <http://www.google.ru>

3 Поисковая система «Рамблер» <http://www.rambler.ru>

4 Поисковая система «Апорт» <http://www.aport.ru>

5 Поисковая система «Поиск@Mail.ru» <http://go.mail.ru>

6 Интеллектуальная поисковая система Nigma
<http://www.nigma.ru>

Международные поисковые системы:

1 Поисковая система Google <http://www.google.com>

2 Поисковая система Live Search <http://www.live.com>

3 Поисковая система Yahoo! <http://search.yahoo.com>

4 Поисковая система AltaVista <http://www.altavista.com>

Российские каталоги интернет-ресурсов общего назначения:

- 1 Каталог интернет-ресурсов «Яндекс.Каталог»
<http://yasa.yandex.ru>
- 2 Каталог интернет-ресурсов «Каталог@mail.ru»
<http://list.mail.ru>
- 3 Каталог интернет-ресурсов «Апорт» <http://www.aport.ru>
- 4 Каталог сайтов-участников рейтинга Rambler Top100
<http://top100.rambler.ru>
- 5 Каталог сайтов-участников рейтинга SpyLOG
<http://dir.spylog.ru>

Каталоги ресурсов для образования:

- 1 Каталог информационной системы «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» <http://window.edu.ru/window/catalog>
- 2 Каталог Российского общеобразовательного портала
<http://www.school.edu.ru>
- 3 Каталог «Образовательные ресурсы сети Интернет для общего образования» <http://catalog.iot.ru>
- 4 Каталог «Школьный Яндекс» <http://school.yandex.ru>
- 5 Каталог детских ресурсов «Интернет для детей»
<http://www.kinder.ru>

Специализированные химические сайты:

- 1 Портал фундаментального химического образования ChemNet
- 2 Химическая информационная сеть: Наука, образование, технологии <http://www.chemnet.ru>
- 3 Газета «Химия» и сайт «Я иду на урок химии»
<http://him.1september.ru>
- 4 Единая коллекция ЦОР: Предметная коллекция «Химия»
<http://school-collection.edu.ru/collection/chemistry>
- 5 Естественно-научные эксперименты: химия.
- 6 Коллекция Российского общеобразовательного портала
<http://experiment.edu.ru>
- 7 АЛХИМИК: сайт Л.Ю. Аликберовой <http://www.alhimik.ru>
- 8 Органическая химия: электронный учебник для средней школы <http://www.chemistry.ssu.samara.ru>

- 9 Основы химии: электронный учебник <http://www.hemi.nsu.ru>
- 10 Открытый колледж: Химия <http://www.chemistry.ru>
- 11 Занимательная химия <http://home.uic.tula.ru/~zanchem>
- 12 Кабинет химии: сайт Л.В. Рахмановой
<http://www.104.webstolica.ru>
- 13 Классификация химических реакций
<http://classchem.narod.ru>
- 14 КонТрен - Химия для всех: учебно-информационный сайт
<http://kontren.narod.ru>
- 15 Материалы кафедры физической и коллоидной химии Южного федерального университета
<http://www.physchem.chimfak.rsu.ru>
- 16 Методика обучения химии: сайт кафедры химии НГПУ
<http://mctnspu.narod.ru>
- 17 Химия и жизнь - XXI век: научно-популярный журнал
<http://www.hij.ru>
- 18 Онлайн-справочник химических элементов WebElements
<http://webelements.narod.ru>
- 19 Электронная библиотека учебных материалов по химии на портале Chemnet <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary>
- 20 Сайт Alhimikov.net: учебные и справочные материалы по химии <http://www.alhimikov.net>
- 21 Сайт Chemworld.Narod.Ru - Мир химии
<http://chemworld.narod.ru>
- 22 Энциклопедия «Природа науки»: Химия
<http://elementy.ru/chemistry>
- 23 Сайт «Мир химии» <http://chemistry.narod.ru>
- 24 ХиМиК.ру: сайт о химии <http://www.ximuk.ru>
- 25 Химическая страничка Ярославского Центра телекоммуникаций и информационных систем в образовании
<http://www.edu.yar.ru/russian/courses/chem>
- 26 Химический портал ChemPort.Ru <http://www.chemport.ru>
- 27 Химический сервер HimHelp.ru: учебные и справочные материалы <http://www.himhelp.ru>
- 28 Химия: Материалы «Википедии» - свободной энциклопедии <http://ru.wikipedia.org/wiki/Химия>

29 Химия для всех: иллюстрированные материалы по общей, органической и неорганической химии <http://school-sector.relarn.ru/nsm>

30 Электронная библиотека по химии и технике <http://rushim.ru/books/books.htm>

Вопросы для самоконтроля

- 1 Этапы построения математической модели
- 2 Постановка задачи математического моделирования
- 3 Отличительные особенности системы компьютерных технологий для инженерных расчетов
- 4 Основные типовых задачи химической технологии и их решение с помощью компьютерных технологий
- 5 Основной принцип построения научных баз данных
- 6 Обработка баз данных
- 7 Поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях
- 8 Принципы работы локальной и глобальной компьютерной сети
- 9 Принципы поиска в Интернет
- 10 Определение понятия химико-технологических систем

Практическая работа №2

«Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений»

Цель работы: освоить методы математического моделирования, используя пакеты термодинамических программ Chemical WorkBench, CHEMKIN, Kintecus, Thermo-Calc и др.

Теоретические основы

Термодинамическое моделирование является разновидностью математического моделирования, имеющее, однако, свои особенности. Компонентами модели являются:

- совокупность допущений о физико-химическом характере системы (степень достижение равновесия, перечень молекулярных форм, присутствующих в равновесной системе, возможность образования растворов и т.д.);

- условия равновесия (сведения об элементном составе и термодинамических параметрах, которые характеризуют равновесное состояние);

- информация о термодинамических свойствах веществ, которые образуют равновесную систему;

- физико-химические модели фаз системы (уравнения состояния фаз или функциональные зависимости характеристических функций фаз от состава и термодинамических параметров системы).

Появление и широкое распространение Интернета способствовали развитию методов термодинамического моделирования. Находясь в одной точке земного шара, термодинамические вычисления можно выполнять на компьютере, который находится на другом континенте. Однако пока все-таки удобнее проводить расчеты на компьютере, который находится на столе исследователя. Рассмотрим наиболее распространенные программы термодинамического моделирования:

Chemical WorkBench - программный комплекс для моделирования, оптимизации и проектирования широкого класса процессов, реакторов и технологий, обусловленных возможностью протекания химических реакций. Chemical WorkBench дает возможность представить реальный процесс в виде цепочки реакторов, каждая из которых моделирует отдельную часть процесса (горение, охлаждение, плазменная обработка и т.д.). В состав программного комплекса включен банк данных, содержащий сведения о термодинамических и термохимических свойствах веществ, а также информацию о константах скоростей химических реакций. Отличительной особенностью программы является возможность моделирования сложных многоступенчатых процессов с химическими превращениями, используя не только равновесные, но и кинетические модели. Структурной единицей модели процесса является реактор - модель некоторой части процесса. Программный комплекс позволяет представить реальный процесс в виде цепочки реакторов (термодинамически равновесного, реактора идеального смешения, реактора идеального вытеснения и т.д.). Исследователь имеет возможность задать параметры для каждого реактора, при этом между реакторами можно установить связь, т.е. передавать

продукты реакции из одного реактора в другой. После проведения расчетов результаты моделирования можно представить в виде графиков и таблиц.

CHEMKIN - пакет программного обеспечения, содержащий множество процедур и функций, облегчающих постановку задач, связанных с исследованием химической кинетики газофазных и гетерогенных процессов, их решение и анализ. Программы и библиотеки процедур могут быть использованы при разработке программных комплексов для моделирования кинетики химических процессов в реагирующих потоках. Средства CHEMKIN можно использовать для анализа процессов горения, катализа, осаждения из газовой фазы и т.д.

В состав CHEMKIN входят:

- совокупность процедур для анализа газофазной химической кинетики и кинетики плазмы;
- совокупность процедур для анализа гетерогенной химической кинетики на границе газ-твердое;
- база данных по термодинамическим свойствам веществ;
- совокупность процедур для расчета свойств переноса газов и газовых смесей (коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности);
- база данных для расчета свойств переноса газов.

Kintecus - программное обеспечение для моделирования процессов в ядерных установках, в биологических системах, в атмосфере, процессов горения и многих других процессов, сопровождающихся химическими превращениями. Отличительной чертой программного обеспечения является возможность использования моделей Chemkin/SENKIN II/III, не требующая суперкомпьютера и перекомпиляции программы. В расчетах могут быть использованы термодинамические базы данных различных форматов. Kintecus позволяет исследовать изотермические и неизотермические процессы, а также адиабатические процессы при постоянном давлении или объеме. В расчетах можно использовать программируемые законы изменения объема (движение поршня в цилиндре), темпера-

туры, концентрации веществ, при этом не требуется вносить изменения в текст программы.

MTDATA - программный комплекс для расчета фазовых равновесий в многофазный многокомпонентных системах, в состав которого входит банк данных, содержащий критически отобранные термодинамические свойства. Программный комплекс ориентирован на решение задач металлургии, химии, материаловедения и геохимии. Область его применимости ограничена только наличием термодинамических данных. С его помощью можно анализировать проблемы смешанного характера, например равновесие между жидкими и твердыми сплавами и штейном, шлаком и газовой фазой. Термодинамические модели, необходимые для анализа соответствующих процессов, включены в состав программного комплекса и учтены при разработке структуры базы данных.

Thermo-Calc - мощная и гибкая программа, предназначенная для выполнения термодинамических расчетов и построения фазовых диаграмм. При разработке программы особое внимание уделялось возможности исследования термодинамических систем с использованием существенно неидеальных моделей. Thermo-Calc развивается начиная с 1981 профессором Королевского Технологического института Бо Сундманом. Программу можно использовать для анализа термодинамических систем в таких областях, как химия, металлургия, материаловедение, геохимия и т.д. в зависимости от той базы данных, которая подключена к комплексу. Процедуры, входящие в состав комплекса, можно использовать в прикладных программах для исследования процессов с химическими превращениями. Thermo-Calc содержит несколько модулей, при помощи которых исследователь может решать интересные его задачи. Например, есть модули для выбора базы данных, просмотра и редактирования сведений в ней. Наиболее важный модуль, предназначенный для расчета равновесного состава, предоставляет возможность проводить вычисления и строить различные диаграммы. Очень полезным является модуль, предназначенный для оценки параметров термодинамических моделей на основании экспериментальной информации. Имеется также модуль, позволяющий представить в табличном виде термодинамические свойства веществ и химических реакций. Система является открытой, по-

этому пользователь имеет возможность разработки своих модулей, используя документированный интерфейс системы. При помощи Thermo-Calc можно моделировать только такие процессы, в которых фактор времени можно игнорировать.

HSC Chemistry - программный комплекс, предназначенный для моделирования равновесных термодинамических состояний и процессов на персональном компьютере. База данных по термодинамическим свойствам веществ, входящая в состав программного комплекса, является компилятивной. Число веществ, информация о которых содержится в базе данных, превышает 10000. Сведения в базе данных не были оценены критически, однако, в базе данных есть ссылка на источник информации. В базе данных предусмотрены поля для структурной формулы, химического названия, общепотребительного названия, номера CAS, температуры плавления, кипения, цвета и растворимости в воде. Данные в этих поля пока занесены только частично.

EQS4WIN - мощный и удобный программный комплекс, предназначенный для решения широкого класса задач, связанных с расчетом фазового и химического состава сложных термодинамических систем в состоянии равновесия. При создании программы использованы современные технологии численного анализа, программирования и термодинамики. Программа была создана под руководством Dr. W. R. Smith. При разработке алгоритма EQS4WIN использован подход, основанный на минимизации энергии Гиббса системы. Программа позволяет рассчитывать равновесный состав в системах, содержащих до 3-х конденсированных растворов, газовую фазу и неограниченное число однокомпонентных конденсированных фаз. В состав всех версий программного комплекса входит база данных по термодинамическим свойствам веществ, сведения в которой заимствованы из таблиц JANAF.

ThermoChemical Calculator (TCC) - интерактивная программа для расчета равновесного состава и свойств термодинамических систем в приближении идеального газа. При разработке программы использован текст библиотеки процедур Chemkin. TCC сопряжен с базой данных по термодинамическим свойствам индивидуальных

веществ, которая может быть использована для расчета состава продуктов сгорания топлив, решения задач химии атмосферы и моделирования процессов осаждения из газовой фазы.

OLI - программное обеспечение для моделирования практически любых многокомпонентных гетерогенных водных растворов. Основой программного обеспечения OLI является OLI Engine, который включает в себя решатели (Solvers), а также анализаторы - Stream Analyser, OLI Express, Water Analyser.

Термодинамический программный комплекс OLI позволяет анализировать многокомпонентные водные растворы, включая жидкую и газовую фазы, растворы органических веществ, в диапазоне температур от -50 до 300 °С при давлении до 1500 бар. В результате вычислений определяются рН, ионная сила, энтальпия, плотность и осмотическое давление.

База данных OLI содержит термодинамические, транспортные и физические свойства веществ, образованных из 79 химических элементов, их свойства в водных растворах, а также свойства более 3000 органических соединений.

ИВТАНТЕРМО - термодинамический банк данных. Принципиальной особенностью системы ИВТАНТЕРМО, отличающей ее от подавляющего числа аналогичных банков данных, является то, что накапливаемые в системе термодинамические данные не заимствуются из различных источников, а вычисляются по постоянным, отобраным в результате критического анализа и обработки всех первичных данных, имеющихся в литературе. Соответствующие обработка и расчеты выполняются с помощью комплекса методов, алгоритмов и программ, созданных при подготовке справочного издания «Термодинамические свойства индивидуальных веществ» и развиваемых его авторами в последние годы для ИВТАНТЕРМО. В настоящее время база данных содержит сведения о свойствах около 2600 веществ, образованных из 96 химических элементов.

THERBASE - предоставляет доступ ко всей информации о веществах, хранящейся в базе данных: химическая формула вещества и его название, реакция диссоциации (сублимации), значения стандартной энтальпии образования, теплоёмкости, энтропии и энтальпии в стандартном состоянии, составляющая

ядерного спина, а также значения коэффициентов аппроксимирующего полинома, сведения о погрешностях энтальпии образования и приведенной энергии Гиббса. Программа позволяет осуществлять просмотр оглавления базы данных, поиск информации о веществе или группе веществ, изменять эту информацию, заносить в базу данных новую информацию, проводить термодинамический анализ заданной химической реакции и т.д. THERBASE может отображать информацию в форматах таблиц TСIB и JANAF, построенных в заданном интервале температур с заданным шагом. Предусмотрена возможность представления информации из таблиц в виде графиков на экране дисплея.

APPROX - программа, предназначенная для расчета коэффициентов аппроксимирующего полинома, если заданы значения температур и теплоемкостей, а также значения основных термодинамических параметров в стандартном состоянии и теплоты фазовых переходов. Результаты расчетов могут быть записаны в текстовый (ASCII) файл или в базу данных. Предусмотрена возможность «конструирования» полинома и расчет его коэффициентов.

НВ - предназначена для расчета теплового и материального баланса между группой исходных веществ и группой продуктов реакции, если известны их температура и количество.

CEA (Chemical Equilibrium with Applications) [**Каталог химических программ** <http://www.twic.ru/cd/cd013.html>] - программа, вычисляющая баланс концентрации химических продуктов из любого набора реагентов и определяющая термодинамические свойства и свойства перемещения для смеси продуктов. Встроенные приложения включают вычисление теоретической эффективности ракеты, параметров взрыва Charman-Jouguet, параметры ударной нагрузки трубы, и свойства сгорания.

Для удобства эксплуатации программы предоставлена возможность использования независимых баз данных по свойствам переноса и термодинамическим свойствам индивидуальных веществ. Прилагаемая база данных содержит сведения о термодинамических свойствах более 1900 веществ. Программа

написана Bonnie J. McBride и Sanford Gordon на стандартном ANSI ФОРТРАНе. Она широко используется для решения задач аэродинамики и термодинамики.

AMMP [Recipe Soft: <http://www.recipe.ru/soft>] - полнофункциональная программа моделирования молекулярной механики и динамики. Может манипулировать как небольшими молекулами так и макромолекулами включая белки, нуклеиновые кислоты и другие полимеры. В дополнение к стандартным характеристикам, таким, как стабильной молекулярной динамике, быстрому методу включения всех атомов в вычисление широкого диапазона потенциалов, позволяет также осуществлять гибкий выбор потенциалов, манипулировать молекулами и анализировать индивидуальные энергетические уровни. Одни из основных преимуществ - позволяет ввести нестандартные связи полимеров, необычные лиганды. Добавляет отсутствующие атомы водорода и дополняет неполные структуры.

Практическое задание

1 Выполнить индивидуальное задание, представленное в таблице 2, используя представленные выше программы термодинамического моделирования.

Таблица 2 - Индивидуальное задание

№ варианта	№ программы	Форма отчета
1	Chemical WorkBench, THERBASE	Презентация
2	CHEMKIN, APPROX	On-line
3	Kintecus, HB	Презентация
4	MTDATA, CEA	On-line
5	Thermo-Calc, AMMP	Презентация
6	HSC Chemistry, Chemical WorkBench	On-line
7	EQS4WIN, CHEMKIN	Презентация
8	ThermoChemical Calculator (TCC), Kintecus	On-line
9	OLI, MTDATA	Презентация
10	ИВТАНТЕРМО, Thermo-Calc	On-line

2 Сделать выводы о проделанной работе. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования, обосновать целесообразность применения наиболее эффективной.

Вопросы для самоконтроля

- 1 Основные компоненты термодинамического моделирования
- 2 Наиболее распространенные программы термодинамического моделирования
- 3 Возможности программного комплекса Chemical WorkBench.
- 4 Использование пакета программного обеспечения CHEMKIN для моделирования кинетики химических процессов в реагирующих потоках
- 5 Отличительные особенности программы Kintecus
- 6 Использование программного комплекса MTDATA для расчета фазовых равновесий в многофазный многокомпонентных системах
- 7 Принцип работы программы Thermo-Calc
- 8 Программный комплекс моделирования равновесных термодинамических состояний и процессов на персональном компьютере с помощью HSC Chemistry
- 9 Особенности использования EQS4WIN
- 10 Интерактивная программа ThermoChemical Calculator (TCC)
- 11 Моделирования многокомпонентных гетерогенных водных растворов с помощью OLI
- 12 Термодинамический банк данных ИВТАНТЕРМО
- 13 Использование THERBASE
- 14 Программа APPROX для расчета коэффициентов аппроксимирующего полинома
- 15 Расчет теплового и материального баланса с помощью программы НВ
- 16 Использование программы СЕА при расчете концентраций химических продуктов
- 17 Полнофункциональная программа моделирования молекулярной механики и динамики AMMP

Практическая работа №3

«Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований»

Цель работы: изучить основные форматы графических файлов таких форматов как GIF, JPEG, BMP и установить зависимости размера файла различных форматов от степени сжатия с учетом субъективной оценки качества (количество оттенков цвета и естественность воспроизведения полутонов на фотографическом изображении, а также четкости воспроизведения резких и плавных границ переходов). Освоить принцип создания компьютерной анимации на примере MS PowerPoint

Теоретические основы

Как известно, любая информация, хранящаяся в файле, - это последовательность байтов. Каждый байт может принимать значение от 0 до 255 (2^8-1). Способ записи информации с помощью последовательности байтов и называют форматом файла, т.е. графический формат - это способ записи графической информации. Способ представления изображения оказывает влияние на возможности его редактирования, печати, на объем занимаемой памяти.

Все графические данные в компьютере можно разделить на две большие части: растровую и векторную.

Растровый формат характеризуется тем, что все изображение по вертикали и горизонтали разбивается на достаточно мелкие прямоугольники - так называемые элементы изображения, или пиксели (от английского pixel - picture element). Растровый файл представляет собой прямоугольную матрицу (bitmap).

В файле, содержащем растровую графику, хранится информация о цвете каждого пикселя данного изображения. Чем меньше прямоугольники, на которые разбивается изображение, тем больше разрешение (resolution), т. е. тем более мелкие детали можно закодировать в таком графическом файле. Размер (size) изображения, хранящегося в файле, задается в виде числа пикселей по горизонтали (width) и вертикали (height). Для примера, оптимальное разрешение 15-дюймового монитора, как правило, составляет 1024x768.

Кроме размера изображения, важной является информация о количестве цветов, закодированных в файле. Цвет каждого пикселя кодируется определенным числом бит. В зависимости от того, сколько бит отведено для цвета каждого пикселя, возможно кодирование различного числа цветов. Если для кодировки отвести лишь один бит, то каждый пиксель может быть либо белым (значение 1), либо черным (значение 0). Такое изображение называют монохромным (monochrome).

Далее, если для кодировки отвести четыре бита, то можно закодировать $2^4=16$ различных цветов, отвечающих комбинациям бит от 0000 до 1111. Если отвести 8 бит - то такой рисунок может содержать $2^8=256$ различных цветов (от 00000000 до 11111111), 16 бит - $2^{16}=65\ 536$ различных цветов (High Color). И, наконец, если отвести 24 бита, то потенциально рисунок может содержать $2^{24}=16\ 777\ 216$ различных цветов и оттенков.

Компьютерное растровое изображение представляется в виде прямоугольной матрицы, каждая ячейка которой представлена цветной точкой. При оцифровке изображения оно делится на такие крошечные ячейки, что глаз человека их не видит, воспринимая все изображение как целое. Сама сетка получила название растровой карты или матрицы (bitmap), а ее единичный элемент называется пикселем.

Пиксели подобны зернам фотографии и при значительном увеличении они становятся заметными. Растровая карта представляет собой набор (массив) троек чисел: две координаты пикселя на плоскости и его цвет. В отличие от векторных изображений, при создании объектов растровой графики математические формулы не используются, поэтому для синтеза растровых изображений необходимо задавать разрешение и размеры изображения.

С помощью растровой графики можно отразить и передать всю гамму оттенков и тонких эффектов, присущих реальному изображению. Растровое изображение ближе к фотографии, оно позволяет более точно воспроизводить основные характеристики фотографии: освещенность, прозрачность и глубину резкости. Чаще всего растровые изображения получают с помощью сканирования

фотографий и других изображений цифровой фотокамерой или путем «захватом» кадра видеосъемки.

Векторы - это математическое описание объектов относительно точки начала координат; рисунок имеет вид комбинации простых геометрических фигур: точек, отрезков прямых и кривых, окружностей, прямоугольников и т. п. При этом для полного описания рисунка необходимо знать вид и базовые координаты каждой фигуры, например, координаты двух концов отрезка, координаты центра и диаметр окружности и т. д.

Иначе говоря, чтобы компьютер нарисовал прямую, нужны координаты двух точек, которые связываются по кратчайшей прямой, для дуги задается радиус и т.д. Таким образом, векторная иллюстрация это набор геометрических фигур.

Основным логическим элементом векторной графики является геометрический объект. В качестве объекта принимаются простые геометрические фигуры (так называемые примитивы - прямоугольник, окружность, эллипс, линия), составные фигуры или фигуры, построенные из примитивов, цветовые заливки, в том числе градиенты:



Преимущество векторной графики заключается в том, что форму, цвет и пространственное положение составляющих ее объектов можно описывать математическими формулами.

Важным объектом векторной графики является сплайн - это кривая, посредством которой описывается та или иная геометрическая фигура. На сплайнах построены современные шрифты TrueType и PostScript.

У векторной графики много достоинств. Она экономна в плане дискового пространства, необходимого для хранения изображений: это связано с тем, что сохраняется не само изображение, а только некоторые основные данные, используя которые, программа всякий раз воссоздает изображение заново. Кроме того, описание цветовых характеристик почти не увеличивает размер файла.

Объекты векторной графики легко трансформируются и модифицируются, что не оказывает практически никакого влияния на качество изображения. Масштабирование, поворот, искривление могут быть сведены к элементарным преобразованиям векторов.

Таким образом, достоинством растровой графики является возможность воспроизведения изображения любого типа и сложности. К основным недостаткам можно отнести значительный размер таких файлов (применение форматов со сжатием частично устраняет этот недостаток) и потери качества изображения при увеличении картинки.

Достоинства векторной графики заключаются в небольших размерах файла изображения, возможности изменения размера рисунка без потери качества и редактирования отдельных частей рисунка, не оказывая влияния на остальные. Однако эти достоинства проявляются только для некоторого класса изображений (например, для чертежей, где много прямых линий, которые легко описываются математически).

Изображение типа фотографии с плавными переходами от одного цвета к другому могут оказаться по размеру в десятки раз больше, чем в одном из растровых форматов.

BMP (Windows Device Independent Bitmap) - родной формат Windows, поддерживаемый всеми графическими редакторами, работающими под управлением этой операционной системы. Применяется для хранения растровых изображений, предназначенных для использования в Windows. Содержит информацию о каждом пикселе, что приводит к значительному размеру файла. Имеется возможность использования сжатия по алгоритму Run Length Encoding (RLE) - один из самых старых и самых простых алгоритмов архивации графики.

Архивация изображения в нем происходит за счет того, что в исходном изображении встречаются цепочки одинаковых байт. Замена их на пары <счетчик повторений, значение> уменьшает избыточность данных. Алгоритм рассчитан на деловую графику: изображения с большими областями повторяющегося цвета.

Ситуация, когда файл увеличивается, для этого простого алгоритма не так уж редка, поэтому использование сжатия для этого формата возможно только для некоторых классов изображений, в которых много длинных серий одинаковых цветов. В формате BMP можно сохранять изображения с глубиной цвета (числом битов, описывающих один пиксель изображения) 1, 4, 8 и 24 бита, что соответствует максимальному числу используемых цветов 2, 16, 256 и 16 777 216 соответственно.

Популярный формат GIF (**CompuServe Graphics Interchange Format**) разработан фирмой CompuServe как не зависящий от аппаратного обеспечения. Этот формат сочетает в себе редкий набор достоинств, неоценимых при той роли, которую он играет в WWW. Формат содержит достаточно хорошо упакованные графические данные.

Как и у программ-архиваторов, степень сжатия графической информации в GIF сильно зависит от уровня ее повторяемости и предсказуемости, а иногда еще и от ориентации картинка. GIF сканирует изображение по строкам, поэтому, например, плавный переход цветов (градиент), направленный сверху вниз, сожмется куда лучше, чем тех же размеров градиент, ориентированный слева направо, а последний - лучше, чем градиент по диагонали.

GIF может иметь любое количество цветов от двух до 256, и если в изображении используется, скажем, 64 цвета (2^6), то для хранения каждого пикселя будет использовано ровно шесть бит и ни битом больше.

Изменив порядок следования данных в файле, создатели GIF заставили картинку рисоваться не только сверху вниз, но и, если можно так выразиться, «с глубины к поверхности», т. е. становиться все четче и детальнее по мере подхода из сети новых данных. Для этого файл с изображением тасуется при записи так, чтобы сначала шли все строки пикселей с номерами, кратными 8 (первый проход), затем 4 (второй проход), потом 2 и, наконец, последний проход - все оставшиеся строки с нечетными номерами.

Во время приема и декодирования такого файла каждый следующий проход заполняет «дыры» в предыдущих, постепенно приближая изображение к исходному состоянию, поэтому такие изображения были названы чересстрочными (interlaced).

Другой полезной возможностью формата является использование прозрачности. Формат может быть использован для создания анимационных изображений. GIF позволяет записывать изображение «через строчку» (interlaced), благодаря чему, имея только часть файла, можно увидеть изображение целиком, но с меньшим разрешением. Это достигается за счет записи, сначала 1-й, 5-й 10-й и т. д. строчек пикселей и растягивания данных между ними, вторым проходом следуют 2-я, 6-я, 11-я строчки, при этом разрешение изображения в интернет-браузере увеличивается. Таким образом, задолго до окончания загрузки файла пользователь может понять, что внутри, и решить, стоит ли ждать, когда файл поступит весь. Чересстрочная запись незначительно увеличивает размер файла, но это, как правило, оправдывается приобретаемым свойством.

В GIF можно назначить один или более цветов прозрачными, они станут невидимыми в интернет-браузерах и некоторых других программах. Прозрачность обеспечивается за счет дополнительного Alpha-канала, сохраняемого вместе с файлом. Кроме того, файл GIF может содержать не одну, а несколько растровых картинок, которые браузеры могут подгружать одну за другой с указанной в файле частотой. Так достигается иллюзия движения (GIF-анимация).

Основное ограничение формата GIF состоит в том, что цветное изображение может быть записано только в режиме 256 оттенков цветов, но для полиграфии этого явно недостаточно.

Формат JPEG (**Joint Photographic Experts Group**) отличается от других графических форматов, прежде всего тем, что он использует сжатие с «потерями» за счет отбрасывания той графической информации, которую обычно не замечает человеческий глаз в реальных изображениях. Однако при сжатии с помощью JPEG изображений с четкими контурами линии начинают заметно «дрожать». Так, например, если изображение содержит какие-либо подписи, то подобный эффект может возникнуть вокруг символов. Этот эффект может быть сведен к минимуму заданием очень высоких значений параметра качества, однако при этом нельзя достичь приемлемых показателей сжатия.

Так как JPEG - это сжатие с потерями, при создании файлов JPEG необходимо быть внимательным. Большинство программ, создающих такие файлы, позволяют задавать значение параметра качества (quality) изображения. Нижние значения позволяют при сжатии JPEG отбрасывать больше информации, в результате чего получаются файлы меньшего размера. В свою очередь, высокие значения ограничивают количество информации, которой можно пренебречь во время сжатия.

При просмотре изображения нужно обращать внимание на следующие моменты:

-на четкие очертания и углы, например, вокруг текста или на контурах деталей изображения, выделяющихся на общем фоне; часто заметно, что контур «смазан» или представляет собой «дрожащую» линию;

-для сжатия JPEG использует мозаику размером 8 на 8 пикселей. При задании слишком низких значений качества могут стать заметными ее границы.

Практическое задание

1 Создать 2 изображения формата BMP (одно типа фотографии с большим количеством оттенком цветов, другое типа гистограммы с небольшим количеством областей, заполненных одинаковым цветом), при этом размер файла будет зависеть от числа бит на пиксель и разрешения изображений.

2 Получить зависимости размера файла от степени сжатия форматов GIF, JPEG, BMP Для файлов форматов GIF, JPEG исследовать влияние степени сжатия на размеры файлов с учетом субъективной оценки качества для фотографического изображения и изображения типа гистограммы. Формат BMP не сжимать.

3 Результаты проведенных исследований оформить в виде таблицы. Сохранить данные изображения в одном из векторных форматов по заданию преподавателя, указать их размеры и субъективно оценить качество фотографии и гистограммы. Указать в отчете размерность изображения (разрешение в пикселях по вертикали и горизонтали) и число битов на пиксель.

4 Сделать выводы об эффективности использования для разного типа изображения разных форматов с учетом степени сжатия и субъективной оценки качества изображения в виде таблицы 3.

Таблица 3 - Влияние качества на сжатие изображения

Степень сжатия (в условных единицах)	Размер файла формата, байт или кбайт					
	JPEG		GIF		BMP	
	Фото	Гистогр.	Фото	Гистогр.	Фото	Гистогр.
1						
2						
3						

Домашнее задание

Выбрать тему из практической работы №1, на которую необходимо сделать презентацию с помощью MS PowerPoint. При работе использовать следующие шаги:

- определиться с содержанием презентации, написав план презентации;

- поиск информации по этому плану, используя Интернет.

- включать PowerPoint.

- определиться с дизайном, подобрав оформление под тематику презентации.

- непосредственное создание слайдов. В любой презентации изначально должно быть сразу 2 слайда. Во-первых, самый первый слайд, на котором должно быть написано название презентации и авторство. Во-вторых, самый последний слайд, на котором пишется «Конец», «Спасибо за внимание», «Доклад окончен». Между ними вставляются слайды, которые будут раскрывать содержание презентации.

- используя план презентации, создавайте слайды и вставляйте туда соответствующий разделу текст. На 1 слайде не должно быть очень много текста. Он должен быть читабелен и разборчив. Рекомендуемое количество слайдов 15-25.

- в презентации должны присутствовать картинки по тематике. Соотношение размера картинки и текста на слайде должно быть 1:3.

- используя прочие анимационные подходы, передайте своей презентации индивидуальность.

Вопросы для самоконтроля

- 1 Способы записи графической информации
- 2 Растровый формат как вид графических данных. Компьютерное растровое изображение
- 3 Основные логические элементы векторной графики. Их преимущества
- 4 Использование BMP для хранения растровых изображений
- 5 Особенности работы с форматом GIF
- 6 Отличительные особенности формата JPEG от других графических форматов

Практическая работа №4

«Персональный компьютер и программное обеспечение спектрофотометра ПЭ-5400УФ»

Цель работы: изучить принцип совместной работы персонального компьютера и программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ

Теоретические основы

Спектрофотометр ПромЭколаб ПЭ-5400УФ применяется в аналитических, биохимических, бактериологических и санитарно-гигиенических лабораториях; лабораториях по экологическому контролю; лабораториях по контролю качества воды, почв, воздуха, пищевых продуктов, сырья и готовой продукции, металлов и сплавов и прочих научно-исследовательских лабораториях.

Возможно подключение спектрофотометра к порту USB персонального компьютера для работы со специальным программным обеспечением, поставляемым с прибором. Данное программное обеспечение работает под управлением операционных систем Windows XP/Vista/7 и реализует различные дополнительные функции:

QA5400 - программа количественного анализа. Она обеспечивает управление спектрофотометром, получение данных с прибора и дальнейшую их обработку. Программа позволяет:

- создавать градуировки по нескольким параллельным измерениям серий стандартных образцов с автоматическим расчетом коэффициентов градуировочного уравнения с помощью одного из

трех видов аппроксимации: линейной, проходящей через начало координат, линейной и квадратичной (параболической);

- использовать прямой ввод известных значений коэффициентов градуировочного уравнения, полученных ранее;

- учитывать при построении градуировки и проведении анализа результат контрольного опыта, когда значение его оптической плотности вычитается из каждого значения оптической плотности стандартных образцов;

- автоматически рассчитывать следующие параметры градуировки: квадрат коэффициента корреляции градуировочного уравнения, максимальное значение среднеквадратического отклонения вычисляемой величины в процентах и максимальная ошибка вычисляемой величины в процентах по всем стандартным образцам;

- проводить анализ на одной заданной длине волны, на основе ранее выполненной градуировки, при этом один файл измерений может содержать результаты анализа до 20-ти образцов до 10-ти параллельных измерений для каждого образца;

- в процессе выполнения анализа для каждого образца автоматически рассчитывать его концентрацию, а также среднее значение концентрации и сходимости в процентах для параллельных измерений;

- распечатывать протоколы градуировки и анализа;

- сохранять в файл и загружать для выполнения анализа ранее созданные градуировки;

- сохранять в файл и загружать из файла результаты анализа;

- экспортировать таблицы данных градуировки и анализа в формат Microsoft Excel™.

XL5x00 - обеспечивает ввод результатов измерения со спектрофотометра в ячейки открытой книги Microsoft Excel™ при нажатии на приборе кнопки ПЕЧАТЬ/УДАЛИТЬ. Таким образом, пользователь может запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel.

Kin5400 - программа кинетического анализа. Измерение образца на одной заданной длине волны, с заданным периодом в те-

чение заданного промежутка времени. Может быть установлена задержка начала измерения на определённое время. При задании параметров измерения, могут быть введены коэффициенты для пересчета оптической плотности в концентрацию.

SC5400 - поставляемая по дополнительному заказу программа сканирования. Обеспечивает управление спектрофотометром, возможность сканирования оптической плотности или пропускания образцов по длинам волн в задаваемом диапазоне длин волн с задаваемым шагом сканирования, нахождение пиков на полученных спектрах, сохранение и загрузку таблицы пиков и таблицы результатов сканирования, а также печать протоколов сканирования. Программа защищена электронным ключом Guardant Sign, поставляемым в комплекте. Без использования ключа программа работает в режиме ограниченной функциональности (демонстрационный режим).

Практическое задание

Перед началом работы ознакомиться с руководством по эксплуатации данного прибора

Получить задание у преподавателя. Выполнить индивидуальное задание, представленное в таблице 4, используя представленное выше программное обеспечение спектрофотометра ПЭ-5400УФ

Таблица 4 - Индивидуальное задание

№ варианта	Вид программы	Наименование исследования
1	QA5400, XL5x00	спектрофотометрическое определение ионов меди (II)
2	QA5400, Kin5400	фотометрическое определение катионных красителей
3	QA5400, SC5400	спектрофотометрическое определение ионов кобальта (II)
4	QA5400, XL5x00	спектрофотометрическое определение ионов железа (II, III) сульфосалицилатным методом
5	QA5400, Kin5400	фотометрическое определение прямых красителей
6	QA5400, SC5400	спектрофотометрическое определение ионов хрома (III)
7	QA5400,	спектрофотометрическое определение ионов

	XL5x00	меди (II)
8	QA5400, Kin5400	фотометрическое определение кислотных красителей
9	QA5400, SC5400	спектрофотометрическое определение ионов кобальта (II)
10	QA5400, XL5x00	спектрофотометрическое определение ионов железа (II, III) сульфосалицилатным методом

Сделать вывод о проделанной работе.

Вопросы для самоконтроля

1 Области применения спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ

2 Устройство и принцип работы спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ

3 Условия эксплуатации спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ

4 Техника безопасности при работе со спектрофотометром ПромЭколаб ПЭ-5400УФ

5 Персональный компьютер и программное обеспечение спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ

6 Возможные неисправности спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ и методы их устранения

7 Программа количественного анализа QA5400

8 Использование XL5x00 для ввод результатов измерения

9 Особенности использование программы кинетического анализа Kin5400

10 Возможности использование SC5400 при управлении спектрофотометром

Список использованных источников

1 Блюмин А.М. Мировые информационные ресурсы: [Текст]: учебное пособие / А.М. Блюмин, Н.А. Феоктистов; М.: Дашков и К, 2011. 296 с

2 Копылов Ю.Р. Компьютерные технологии в машиностроении (практикум+CD): [Комплект]: учебное пособие / Ю.Р. Копылов. Воронеж: Изд.-полиграф. центр «Научная книга», 2012. 508 с.

3 Информатика. Базовый курс: [Текст]: учебное пособие / под ред. С.В. Симоновича. - 3-е изд. - СПб.: Питер, 2012. 640 с.

4 Молекулярное моделирование. Теория и практика / Хельтзе Х.-Д. [и др.]; пер. с англ. А.А. Олиференко и др.; под ред. В.А. Паюлина и Е.В. Радченко. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. 318 с.

5 Информатика для химиков-технологов: [Текст]: учебное пособие /Л.С. Гордеев. М.: Высшая школа, 2006. 286 с.

6 Работа в Интернете: от бытового до профессионального поиска: [Текст]: практическое пособие / В.Н. Романенко, Г.В. Никитина, В.С. Неверов. СПб.: Профессия, 2008. 416 с.

7 Информатика: [Текст]: учебное пособие / И.М. Острейковский: Высшая школа, 2003. 319 с.

8 Численные методы: [Текст]: учебное пособие / Е.А. Волков. М.: Лань. - 2007. - 256 с.

9 Информационные технологии: [Текст]: учебник / Ю. Шафрин. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 1998. 704 с.