

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

**«Применение ЭВМ в каталитических исследованиях»
Модульная программа спецкурса, семинаров и само-
стоятельной работы студентов**

Курс 1-й, II семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов 1-го курса факультета естественных наук, направление подготовки 020100 «Химия (магистр)». В состав пособия включены: программа семинарских занятий спецкурса " Применение ЭВМ в каталитических исследованиях ", структура спецкурса и методические указания к выполнению заданий.

Составитель

Малозёмов Ю.В., ст. преп.

© Новосибирский государственный университет, 2014

Содержание

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели и задачи спецкурса	6
2. Компетенции учащихся, формируемые в результате обучения	7
Рабочий план (по занятиям 8-го семестра)	11
Программа семинарских занятий	
I. Введение, принципы организации эффективной работы, методы применения ЭВМ	13
II. Mathcad, решение научно-инженерных задач	13
III. Excel, решение научно-исследовательских задач	13
IV. Access, хранение и обработка данных	14
V. Макросы, VBA программирование	16
VI. VBA автоматизация, OLE управление	18
VII. Ассемблер MASM32, основные стадии программирования, элементы архитектуры ЭВМ (регистры, стек, память, FPU), связь с языками высокого уровня, возможности ассемблера для работы с внешними устройствами	20

Аннотация рабочей программы

Спецкурс «Применение ЭВМ в каталитических исследованиях» относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) магистр). Спецкурс реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой катализа и адсорбции.

Целью спецкурса является закрепление у учащихся практических навыков эффективного применения ПЭВМ в научных исследованиях в области катализа. Спецкурс направлен на решение типовых задач, с которыми сталкивается научный исследователь, таких как анализ и первичная обработка экспериментальных данных, работа и хранение больших объёмов информации, решение научно-инженерных задач, задачи автоматизации и управления.

Спецкурс нацелен на формирование у выпускника общекультурных компетенций: (ОК) - ОК-5 и профессиональных компетенций (ПК) - ПК-2, ПК-3, ПК-5, ПК-10.

Преподавание спецкурса предусматривает следующие формы организации учебного процесса: семинарские занятия, решение задач (в компьютерном классе и дома), консультации, самостоятельная работа студента, сдача зачета.

Программой спецкурса предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. В течение одного семестра обучения студенты проходят шесть основных тем, выполняя по каждой теме типовые зачётные задания. По согласованию с преподавателем студенту также разрешается самостоятельно составлять, выполнять и сдавать свои зачётные задания, используя экспериментальный материал своей лаборатории, если они позволяют проиллюстрировать учебный материал темы, получить конечный результат и объяснить, как он был получен. Учитывая сложность материала спецкурса и ограниченное количество учебных часов, для выполнения и сдачи заданий разрешается групповое выполнение заданий несколькими студентами (по 2-3 человека в группе), при активном участии каж-

дого студента группы. Такая форма выполнения заданий позволяет легче усвоить и закрепить полученный на занятиях материал, получить полезные навыки работы в коллективе, использовать полученные на занятиях знания для решения своих собственных научных задач. При решении задач преподавателем даются рекомендации по выбору метода решения, проводятся консультации по составлению плана, блок-схемы и разработке алгоритма решения. От учащихся требуется регулярное посещение занятий, активная работа на занятиях, получение конечного результата, его проверка и объяснение как он был получен.

Итоговый контроль. Итоговую оценку за семестр (зачёт) студент получает после успешной сдачи всех зачётных заданий по каждой теме (индивидуально или в составе группы).

Программой спецкурса предусмотрено 24 часов семинарских занятий и 36 часов самостоятельной работы студентов.

1. Цели и задачи спецкурса

Спецкурс «Применение ЭВМ в каталитических исследованиях» направлен на повышения эффективности труда учащихся при работе с ЭВМ применительно к научно-исследовательским задачам в области катализа. Помимо знакомства с современными методами решения, которые постоянно развиваются, большое внимание уделяется простым принципам организации эффективной работы на ЭВМ, таким как рациональность и эргономичность при выполнении повторяющихся рутинных действий. В процессе обучения учащиеся знакомятся с практическими приёмами работы, повышающие эффективность труда, а также с типовыми задачами, в которых они используются.

В настоящее время ЭВМ получили массовое распространение во всех областях знаний как инструмент по работе с информацией, поэтому грамотное и эффективное применение ЭВМ является необходимой составляющей современного специалиста. Методы использования ЭВМ можно разделить на 3 группы: применение стандартного программного обеспечения; применение специализированного программного обеспечения; разработка и программирование собственного узкоспециализированного программного обеспечения. Спецкурс знакомит учащихся со всеми тремя группами методов и обращает внимание на сильные и слабые стороны каждого метода, а также даёт рекомендации по использованию каждого метода. Все методы иллюстрируются практическими примерами, которые моделируют реальные задачи применения ЭВМ.

Учитывая ограниченность учебного времени спецкурса и объём материала, изложение носит в ряде случаев обзорный характер, например на углублённое изучение программирования и работы с базами данных необходимо от 2-х до 4-х семестров. Тем не менее, в спецкурсе обращается внимание на возможности и тенденции современного развития вычислительной техники. В практическом плане спецкурс решает задачи поддержания компьютерной грамотности учащихся на необходимом уровне и создаёт задел для более углублённого изучения и использования ЭВМ при необходимости.

2. Компетенции учащихся, формируемые в результате обучения:

- **общекультурные компетенции (ОК):**
- *владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5);*
- **профессиональные компетенции (ПК):**
- *знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);*
- *владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с профильной направленностью магистерской диссертации) (ПК-3);*
- *способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-5).*
- *способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения (ПК-10).*

В результате освоения курса учащийся должен:

- иметь представление о возможностях ЭВМ в решении научно-инженерных задач;
- знать основные методы эффективной работы на ЭВМ;
- уметь решать с помощью ЭВМ типовые научно-инженерные задачи.

Специализированное программное обеспечение компьютерного курса

Система Mathcad компании Mathsoft имеет мощные средства для реализации численных методов расчета и математического моделирования в научно-технических вычислениях. Все это дополняется средствами визуализации вычислений – от представления исходных данных и результатов вычислений в естественном математическом виде до цветной графики высокого разрешения. В компьютерном курсе система “Mathcad” используется для моделирования каталитических процессов.

3. Материально-техническое обеспечение дисциплины


Компьютерный терминальный класс – 10 рабочих мест,
Сервер (в настоящее время (н/в) Dell Power Edge R-420),
Персональные компьютеры с необходимым ПО (в н/в ПЭВМ P4-2800 Celeron II, Мультимедийный проектор (в н/в Epson EB-1860),
Настенный проекционный экран.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению 020100 Химия».

Авторы: Малоземов Юрий Витальевич, старший преподаватель кафедры катализа и адсорбции ФЕН НГУ


_____ подпись

Программа одобрена на заседании кафедры катализа и адсорбции ФЕН "21" апреля 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент  И.В. Делий