

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
Проф. Д.А. Таюрский

» 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы компьютерного программирования в приложении к химическим задачам

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший преподаватель, б/с Мухтарова Т.М. (кафедра анализа данных и исследования операций, отделение фундаментальной информатики и информационных технологий),
Tatyana.Moukhtarova@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3).
ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные понятия алгоритмизации;
- синтаксис языка программирования Python;
- принципы разработки программ.

Должен уметь:

- разрабатывать алгоритмы для решения задач в виде псевдокода и записывать их на языке программирования Python;
- применять базовые алгоритмы, которые являются основой для решения более сложных задач;
- работать с основными, наиболее часто используемыми структурами данных, такими как массивы, символьные строки, двумерные массивы, структуры;
- создавать программы для реализации основных операций линейной алгебры (сложение, умножение векторов, матриц, вычисление собственных значений и собственных векторов матриц, и т.д.), используемых для решения химических задач;
- создавать собственные программы для поиска, выборки, объединения и другой обработки данных, хранящихся в файлах;
- разбивать программу на отдельные составные части и оформлять их в виде пользовательских функций;
- пользоваться имеющимися библиотечными функциями

Должен владеть:

- навыками работы в IDE PyScripter;

Должен демонстрировать способность и готовность:

уметь решать поставленные задачи.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ОД.4 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к обязательным дисциплинам.

Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 26 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 26 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 46 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Алгоритм.	1	0	4	0	10
2.	Тема 2. Основы языка Python.	1	0	4	0	6
3.	Тема 3. Модульное программирование.	1	0	4	0	4
4.	Тема 4. Функциональное программирование.	1	0	4	0	4
5.	Тема 5. Обработка последовательностей	1	0	4	0	10
6.	Тема 6. Численные алгоритмы. Матричные вычисления.	1	0	4	0	6
7.	Тема 7. Обработка текстов. Регулярные выражения.	1	0	2	0	6
	Итого		0	26	0	46

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Алгоритм.

Практическое занятие - изучение основ программирования: Определение алгоритма. Свойства алгоритмов. Этапы решения задачи на ЭВМ. Виды алгоритмов. Способы записи алгоритмов. История создания языка.

Тема 2. Основы языка Python.

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Основные алгоритмические конструкции. Встроенные типы данных, выражения, имена.

Тема 3. Модульное программирование.

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Понятие модуля. Встроенные функции. Обзор стандартной библиотеки.

Тема 4. Функциональное программирование.

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Определение функций. Параметры и возвращаемые значения. Вызов функций.

Тема 5. Обработка последовательностей

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Свойства последовательностей. Методы обработки последовательностей. Функции `iter()`, `enumerate()`, `sorted()`, `chain()`, `repeat()`, `count()` и др. Итераторы.

Тема 6. Численные алгоритмы. Матричные вычисления.

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Создание массивов. Методы массивов. Срезы. Универсальные функции. Функции модулей `Numeric`, `LinearAlgebra`, `RandomArray`.

Тема 7. Обработка текстов. Регулярные выражения.

Практическое занятие - изучение основ языка Python: Обработка текстов. Регулярные выражения. Строки, операции над строками. Индексы и срезы. Модуль `String`. Понятие регулярного выражения. Синтаксис. Объекты-шаблоны. Параметры шаблонов. Отладка регулярных выражений.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модуля).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Википедия - <http://ru.wikipedia.org/wiki/Python>

Интернет-Университет Информационных Технологий - <http://www.INTUIT.ru>
(<http://www.intuit.ru/department/pl/python>)

Сайт разработчиков на Python - <http://diveinto.python.ru/toc.html>

Самоучитель Python - <http://pythonworld.ru/samouchitel-python>

Электронная библиотека - <http://profismart.ru/web/bookreader-87706.php>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Методические рекомендации по выполнению письменных домашних заданий:

Письменные домашние задания следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю (заранее, не в день сдачи домашнего задания). Ответы должны включать также и сам ход решения (алгоритм).

Методические указания по выполнению контрольных работ:

При подготовке к контрольной работе следует повторно разобрать задания, которые были разобраны на семинарских занятиях и выполнены самостоятельно.

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;

- контрольная работа выполняется на компьютере и подразумевает написание программы на языке Python, которая выполняет действия, описанные в задании;

- ответ на каждое задание - это программа, выполняющая требуемые действия, а также ее код.

Методические рекомендации по выполнению творческого задания:

Целью выполнения индивидуального задания является

- закрепление теоретических знаний, полученных в ходе изучения данного курса

- приобретение практических навыков по разработке и отладке программ на языке программирования Python

- изучение литературы и применение полученных знаний в ходе выполнения индивидуального проекта.

Выполнение задания требует от студента комплексного применения своих знаний как в части владения языком программирования, так и в части умения реализовывать сложные алгоритмы.

Индивидуальное задание является строго обязательными, выполняется каждым студентом в виде программы на языке программирования, которая решает поставленную перед ним задачу.

План выполнения задания:

1. Получение и усвоение задания.
2. Формализация решения задачи в форме, удобной для дальнейшего решения задачи на ПК.
3. Разработка алгоритм решения задачи.
4. Написание программы на языке программирования.
5. Выборка исходных данных и подготовка примера решения задачи согласно заданию.
6. Выполнение отладку программы.
7. Анализ полученных результатов и подтверждение правильности выполнения контрольного примера.

Методические указания по подготовке к зачету:

Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие затруднения при теоретическом изучении и решении практических задач.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
**Б1.В.ОД.4 Основы компьютерного программирования в
приложении к химическим задачам**

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Информатика: Учебник / Каймин В. А. - 6-е изд. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 285 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=504525>
2. Численные методы и программирование: Учебное пособие / Колдаев В.Д.; Под ред. Гагариной Л.Г. - М.:ИД ФОРУМ, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 336 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=546692>
3. Алгоритмизация и программирование : Учебное пособие / С.А. Канцедал. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 352 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=429576>

Дополнительная литература:

1. Андрианова, Анастасия Александровна (канд. физ.-мат. наук ; 1978-) . Практикум по курсу 'Алгоритмизация и программирование' [Текст: электронный ресурс] : [учебное пособие] / Андрианова А. А., Мухтарова Т. М. ; Казан. гос. ун-т, Фак. вычисл. математики и кибернетики .- (Казань : Казанский федеральный университет, 2008) .
[Ч. 1] [Текст: электронный ресурс] .- Электронные данные (1 файл: 0,8 Мб) .- (Казань : Казанский федеральный университет, 2013) .- Загл. с экрана .- Для 1-го года обучения .- Документ является электронной копией оригинала: Практикум по курсу 'Алгоритмизация и программирование': [учебное пособие. Ч. 1] / А. А. Андрианова, Т. М. Мухтарова. -- Казань: [Изд-во Казан. гос. ун-та], 2008. -- Фондодержатель Научная библиотека Казанского федерального университета .- Режим доступа: открытый. - URL: http://libweb.kpfu.ru/ebooks/09_63.pdf
2. Андрианова, Анастасия Александровна (канд. физ.-мат. наук ; 1978-) .
Практикум по курсу 'Алгоритмизация и программирование' [Текст: электронный ресурс] : [учебное пособие] / Андрианова А. А., Мухтарова Т. М. ; Казан. гос. ун-т, Фак. вычисл. математики и кибернетики .- (Казань : Казанский федеральный университет, 2009) .
Ч. 2 [Текст: электронный ресурс] / А. А. Андрианова, Л. Н. Исмагилов, Т. М. Мухтарова .- Электронные данные (1 файл: 1,8 Мб) .-(Казань : Казанский федеральный университет, 2013) .- Загл. с экрана .- Для 1-го года обучения . -- Казань: [Изд-во Казан. гос. ун-та], 2008. -- Фондодержатель Научная библиотека Казанского федерального университета .- Режим доступа: открытый. - URL:http://libweb.kpfu.ru/ebooks/09_64_ds018.pdf.
3. Прохоренок Н. А. Python. Самое необходимое. - СПб.: БХВ-Петербург, 2011. - 414 с. - URL: <http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=354989>
4. Информатика : базовый курс : учебное пособие для студентов высших технических учебных заведений / под ред. С. В. Симоновича .- 2-е изд. - Санкт-Петербург [и др.] : Питер, 2010 .- 639 с.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ОД.4 Основы компьютерного программирования в
приложении к химическим задачам

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.