

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талюцкий Д.А.



20\_\_ г.

подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Основы компьютерного программирования в приложении к химическим задачам Б1.В.ОД.4

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Мухтарова Т.М.

**Рецензент(ы):**

Миссаров М.Д.

### **СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Миссаров М. Д.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от "\_\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 737415

Казань  
2015

## **Содержание**

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

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. Цели освоения дисциплины

Курс представляет собой цикл лабораторно-практических занятий, позволяющих быстро освоить основные приемы разработки алгоритмов и написания программ на языке программирования Python. Главный акцент ставится на разработку приложений, связанных с обработкой данных в применении к химическим задачам.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ОД.4 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к обязательные дисциплины. Осваивается на 1 курсе, 1 семестр.

Дисциплина "Основы компьютерного программирования в приложении к химическим задачам" изучается в первом семестре первого курса обучающихся по направлению 020100 "Химия", профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Форма обучения - очная. Дисциплина относится к циклу М.2 профессиональных дисциплин, его вариативной части М2.Р.2.

Знания по этому курсу требуются в дальнейшем при изучении учебных дисциплин "Программирование на языке С, С++ и Java", "Компьютеры, операционные системы и сети" и др., которые предусмотрены учебным планом по направлению "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Навыки, полученные при изучении этого предмета, будут использованы студентами при написании научных и дипломных работ.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

| Шифр компетенции                       | Расшифровка приобретаемой компетенции                                                                                                                                                                                  |
|----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОК-5<br>(общекультурные компетенции)   | владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований |
| ПК-3<br>(профессиональные компетенции) | владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой магистерской диссертации)                                                                                           |
| ПК-5<br>(профессиональные компетенции) | способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения                                                                                                                |
| ПК-7<br>(профессиональные компетенции) | умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)                                                   |

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

? основные понятия алгоритмизации;

? синтаксис языка программирования Python;  
? принципы разработки программ.

2. 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

3. должен владеть:

? навыками работы в IDE PyScripter;

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Уметь решать поставленные задачи.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 1 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

| N  | Раздел<br>Дисциплины/<br>Модуля | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|----|---------------------------------|---------|--------------------|-------------------------------------------------------------------|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|    |                                 |         |                    | Лекции                                                            | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| 1. | Тема 1. Алгоритм.               | 1       | 1,2                | 0                                                                 | 4                       | 0                      | домашнее<br>задание       |

| N  | Раздел<br>Дисциплины/<br>Модуля                    | Семестр | Неделя<br>семестра | Виды и часы<br>аудиторной работы,<br>их трудоемкость<br>(в часах) |                         |                        | Текущие формы<br>контроля |
|----|----------------------------------------------------|---------|--------------------|-------------------------------------------------------------------|-------------------------|------------------------|---------------------------|
|    |                                                    |         |                    | Лекции                                                            | Практические<br>занятия | Лабораторные<br>работы |                           |
| 2. | Тема 2. Основы языка Python.                       | 1       | 3-5                | 0                                                                 | 4                       | 0                      | контрольная работа        |
| 3. | Тема 3. Модульное программирование.                | 1       | 6                  | 0                                                                 | 4                       | 0                      | домашнее задание          |
| 4. | Тема 4. Функциональное программирование.           | 1       | 6,7                | 0                                                                 | 4                       | 0                      | домашнее задание          |
| 5. | Тема 5. Обработка последовательностей              | 1       | 8,9                | 0                                                                 | 4                       | 0                      | контрольная работа        |
| 6. | Тема 6. Численные алгоритмы. Матричные вычисления. | 1       | 10-12              | 0                                                                 | 4                       | 0                      | домашнее задание          |
| 7. | Тема 7. Обработка текстов. Регулярные выражения.   | 1       | 12-14              | 0                                                                 | 4                       | 0                      | отчет                     |
|    | Тема . Итоговая форма контроля                     | 1       |                    | 0                                                                 | 0                       | 0                      | зачет                     |
|    | Итого                                              |         |                    | 0                                                                 | 28                      | 0                      |                           |

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Алгоритм.

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

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 (4 часа(ов)):**

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

### Тема 3. Модульное программирование.

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

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

### Тема 4. Функциональное программирование.

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

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

### Тема 5. Обработка последовательностей

#### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

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 (4 часа(ов)):**

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 (4 часа(ов)):**

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.

## **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

| N  | Раздел Дисциплины                                  | Семестр | Неделя семестра | Виды самостоятельной работы студентов | Трудоемкость (в часах) | Формы контроля самостоятельной работы |
|----|----------------------------------------------------|---------|-----------------|---------------------------------------|------------------------|---------------------------------------|
| 1. | Тема 1. Алгоритм.                                  | 1       | 1,2             | подготовка домашнего задания          | 10                     | домашнее задание                      |
| 2. | Тема 2. Основы языка Python.                       | 1       | 3-5             | подготовка к контрольной работе       | 6                      | контрольная работа                    |
| 3. | Тема 3. Модульное программирование.                | 1       | 6               | подготовка домашнего задания          | 4                      | домашнее задание                      |
| 4. | Тема 4. Функциональное программирование.           | 1       | 6,7             | подготовка домашнего задания          | 4                      | домашнее задание                      |
| 5. | Тема 5. Обработка последовательностей              | 1       | 8,9             | подготовка к контрольной работе       | 10                     | контрольная работа                    |
| 6. | Тема 6. Численные алгоритмы. Матричные вычисления. | 1       | 10-12           | подготовка домашнего задания          | 6                      | домашнее задание                      |
| 7. | Тема 7. Обработка текстов. Регулярные выражения.   | 1       | 12-14           | подготовка к отчету                   | 4                      | отчет                                 |
|    | Итого                                              |         |                 |                                       | 44                     |                                       |

## **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

Дисциплина представляет собой цикл лабораторных (практических) занятий. Занятия посвящены выработке навыков составления алгоритмов и написания программ для обработки различных данных на языке программирования Python, а также изучению и использованию встроенных функций из имеющихся модулей и библиотек. Практические занятия проходят в активной форме, в компьютерных классах, оснащенных мультимедийным оборудованием.

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### **Тема 1. Алгоритм.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Решение типовых задач на составление алгоритмов ( работа с базовыми типами данных)

## **Тема 2. Основы языка Python.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Подготовка к контрольной работе ( изучение тем: основные операторы, синтаксис языка) , составление программ для решения типовых задач на языке Python

## **Тема 3. Модульное программирование.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Решение задач на применение принципов модульного программирования.

## **Тема 4. Функциональное программирование.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Решение задач на использование функций в программах на Python.

## **Тема 5. Обработка последовательностей**

контрольная работа , примерные вопросы:

Подготовка к контрольной работе, решение задач на использование списков, словарей, кортежей и строк.

## **Тема 6. Численные алгоритмы. Матричные вычисления.**

домашнее задание , примерные вопросы:

Решение задач матричной алгебры на языке.

## **Тема 7. Обработка текстов. Регулярные выражения.**

отчет , примерные вопросы:

Самостоятельное решение индивидуального задания по теме. Предоставление отчета по процессу разработки.

## **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Текущий контроль успеваемости производится с помощью выполнения студентами контрольной работы и решения индивидуальных задач.

Примерный вариант контрольной работы по теме "Разработка программ для решения простых задач".

1. Дан массив целых чисел. Определить, являются ли его элементы уникальными.
2. Написать функцию для перемножения матрицы и вектора.

### **7.1. Основная литература:**

1. Гусева, Е. Н. Информатика [Электронный ресурс] : Учеб. пособ. / Е. Н. Гусева и др. - 3-е изд., стереотип. - М. : Флинта, 2011. - 260 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=406040>
2. Каймин В. А. Информатика: Учебник / В.А. Каймин; Министерство образования РФ. - 6-е изд. - М.: ИНФРА-М, 2010. - 285 с.: <http://znanium.com/bookread.php?book=224852>
3. Андрианова, А.А. Объектно-ориентированное программирование на C++. Часть 1. / А.А.Андрианова, Л.Н.Исмагилов, Т.М.Мухтарова. - Казань: Казанский федеральный университет, 2010.- 124 с.
4. Андрианова, А.А. Объектно-ориентированное программирование на C++. Часть 2. / А.А.Андрианова, Л.Н.Исмагилов, Т.М.Мухтарова. - Казань: Казанский федеральный университет, 2010.- 116 с.
5. Соловьев, И.А. Вычислительная математика на смартфонах, коммуникаторах и ноутбуках с использованием программных сред Python / И.А. Соловьев, А.В. Червяков, А.Ю. Репин - М.: "Лань", 2012 - 272 с. // [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=667](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=667)

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Андрианова А.А., Мухтарова Т.М. Практикум по курсу "Алгоритмизация и программирование". Часть 1. - Казань: Казанский государственный университет, 2008.- 96 с.
2. Андрианова А.А., Исмагилов Л.Н., Мухтарова Т.М. Практикум по курсу "Алгоритмизация и программирование". Часть 2. - Казань: Казанский государственный университет, 2009.- 132 с.
3. Информатика. Базовый курс : учебное пособие для студентов высших технических учебных заведений / под ред. С. В. Симоновича .? 2-е изд. ? Санкт-Петербург [и др.] : Питер, 2008 .? 639 с.
4. Труды Института системного программирования РАН  
[http://elibrary.ru/title\\_about.asp?id=31961](http://elibrary.ru/title_about.asp?id=31961)
5. Новые компьютерные технологии  
[http://elibrary.ru/title\\_about.asp?id=38755](http://elibrary.ru/title_about.asp?id=38755)

## 7.3. Интернет-ресурсы:

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>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Основы компьютерного программирования в приложении к химическим задачам" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. 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, УМК, 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 профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. 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.

Компьютерный класс Химического института им. А.М. Бутлерова с предустановленным программным обеспечением. Все программное обеспечение, используемое при изучении дисциплины является свободно распространяемым и бесплатным.

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

Автор(ы):

Мухтарова Т.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Миссаров М.Д. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.