

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора

з навчальної роботи

Грабчук І.П.

«___» _____ 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Програмування в хемоінформатиці

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність 102 Хімія
освітній рівень магістр
освітня програма Високі технології (хемоінформатика)

вид дисципліни вибіркова

Форма навчання денна
Навчальний рік 2022/2023
Семестр другий
Кількість кредитів ECTS 4
Мова викладання, навчання
та оцінювання українська
Форма заключного контролю залік

Викладач: Цюпа К.С.

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: Цюпа К.С.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії



_____ (Рябухін С.В.)

Протокол №7 від «19» серпня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол №1 від «9» вересня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____



(Русінчук Н. М.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Ознайомлення студентів з базовим інструментарієм розробки програмного забезпечення та хемоінформатики. Напрацювання навичок використання цього інструментарію. Вивчення теоретичних основ розробки ПЗ.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Студент має знає фундаментальні основи органічної хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс поєднує основи програмування та основи хемоінформатики. Викладаються хемоінформатичні способи запису хімічних сполук та базовий інструментарій розробки ПЗ. Отриманні знання закріплюються у практичних роботах.

4. Завдання (навчальні цілі)

Даний курс покликаний сформувати у студентів такі компетентності:

Загальні компетентності (ЗК)

1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.
2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.
3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.
6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).
7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.
8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).
10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.
11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).
12. Здатність працювати автономно.
13. Здатність до активного збереження довкілля.
14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

Фахові компетентності (ФК)

1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
3. Здатність організувати, планувати та реалізувати хімічний експеримент.
4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).
8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.
9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	Знати:	Лекції	Контрольні роботи	20%
	1.1 базовий інструментарій розробки ПЗ 1.2 основні шаблони розробки ПЗ			Проміжний контроль 20%
2.	Вміти: 2.1 вирішувати типові задачі розробки ПЗ, розкласти складні задачі на простіші, зводячи до типових.	Практичні заняття	Практичні роботи	40%
3.	Автономність та відповідальність: 3.1 планувати архітектуру невеликого, повноцінного застосунку; тримати кодову базу чистою та готовою до розширення.	Лекції, Практичні заняття	Індивідуальний проєкт	20%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	1.1	1.2	2.1	3.1
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+	
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+	+
P4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.	+	+	+	
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+	
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+		
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.	+			+
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.		+	+	
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+	+	
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.		+	+	+
P12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.		+	+	
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.			+	
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.			+	
P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.	+	+	+	

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота – РН 1.1, РН 1.2 – 20 балів/ 12 балів
2. Проміжний контроль – РН 1.1, РН 1.2 – 20 балів/ 12 балів
3. Практичні роботи – РН 2 – 40 балів/ 24 балів
4. Індивідуальний проєкт РН 3. – 20 балів/ 12 балів

- підсумкове оцінювання: відсутнє.

7.2 Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота проводиться після завершення курсу.

Проміжний контроль проводиться після кожної лекції по 2 бали кожна у формі тесту з 5 питань.

Практичні роботи студент виконує індивідуально. Під час практичних занять кожен захищає роботу індивідуально. Має описати загальний підхід до виконання роботи, впевнено відповідати на запитання з теми та, на вимогу, модифікувати роботу, відповідно до зміненого завдання.

Для виконання *індивідуального проєкту* студенту пропонується перелік тем з яких необхідно обрати одну. Має описати загальний підхід до виконання роботи, впевнено відповідати на запитання з теми та, на вимогу, модифікувати роботу, відповідно до зміненого завдання.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та практичних занять

№ п/п	Номер і назва теми*	Кількість годин		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
1	Тема 1. Вступ та історія програмування. Складові частини комп'ютера, виконання команд процесором, робота оперативної та фізичної пам'яті. Робота компілятора та інтерпретатора. Складові частини програмування: синтаксис, прикладні бібліотеки, алгоритми та структури даних, архітектура ПЗ, групова робота, практика програмування.	2		2
2	Тема 2. Синтаксис мови Python 3. Оператори, прості типи даних, зарезервовані слова, умови, логічні оператори та операції, цикли, блоки програми. Вбудовані функції мови Python 3.	2	2	6
3	Тема 3. Процедури та функції. Поняття процедур та функцій, рекурсії. Метод декомпозиції. Середовища розробки. Принцип чистоти коду.	2	2	8

4	Тема 4. Прикладні бібліотеки. RDKit. Поняття бібліотеки, порядок виконання під час виклику бібліотеки. Розбір прикладної бібліотеки RDKit	2	2	8
5	Тема 5. Тестування. Перевірка працездатності програми, обробка та виклик помилок, автоматизоване тестування. Поняття фреймворку.	2	2	8
6	Тема 6. Об'єктно орієнтоване програмування. Поняття класу екземпляру, методу та поля. Переваги та недоліки порівняно з процедурним та функціональним програмуванням. Поняття стану об'єкту та його поведінки. Поняття наслідування, материнського та дочірнього класів.	2	4	16
7	Тема 7. Алгоритми та структури даних. Поняття алгоритму. Складність алгоритму: очікувана, максимальна. Допоміжна пам'ять. Структури масиву та списку. Древа та графи.	2	2	8
8	Тема 8. Робота з UI інтерфейсом. Основний цикл програми. Поняття потоку, багатопоточності та переривання. Відмальовування примітивів. Реєстрація переривань.	2	2	8
9	Тема 9. Привила чистого коду. Шаблони програмування. Правила підбору назв для класів, методів, параметрів, екземплярів. Рекомендації щодо архітектурних рішень. Шаблони програмування GRASP.	2	2	8
10	Тема 10. Мережа інтернет. Протоколи передачі даних: HTTP, HTTPS, FTP. Принципи роботи серверів. GET, POST, DELETE запити. Зв'язок з серверами СУБД.	2	2	8

Загальний обсяг *120 год.*, в тому числі:

Лекції – *20 год*

Практичні – *20 год.*

Самостійна робота – *80 год.*

9. Рекомендовані літературні джерела:

Основна:

1. Довгалець С. М. Алгоритмічні мови та програмування. Частина 1. Основи інформатики та комп'ютерної техніки. Навчальний посібник / С. М. Довгалець, Р. В. Маслій. – Вінниця : ВНТУ, 2009. – 116 с
2. Яковенко А. Основи програмування: методичні вказівки до виконання комп'ютерних практикумів з дисципліни "Основи програмування". Основи програмування мовою Python / А. В. Яковенко. – Київ : НТУУ "КПІ ім. І. Сікорського", 2017. – 87 с.
3. Knuth D. E. The Art of Computer Programming, Volumes 1-4A / D. E. Knuth. – Massachusetts: Addison-Wesley, 2011 – 3168 pp.

Додаткова:

1. <https://docs.python.org/3/>
2. <https://www.geeksforgeeks.org/python-programming-language/>
3. <https://www.w3schools.com/python/default.asp>