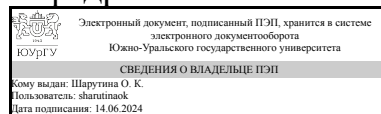


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



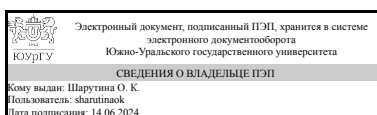
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М1.04.01 Программирование на языке Python для химиков:
проектное обучение
для направления 04.04.01 Химия
уровень Магистратура
магистерская программа Хемоинформатика
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

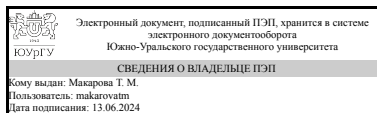
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины является освоение студентами основных синтаксических и функциональных возможностей высокоуровневого языка программирования общего назначения Python для обработки файлов, потоков и данных для выполнения задач молекулярного моделирования молекул, полимеров и многокомпонентных систем. Задачи дисциплины: 1) Освоение синтаксиса языка Python 2) Освоение основных элементов структурной парадигмы программирования (переменные, команды, последовательность, ветвление, цикл и т. д.) в синтаксисе Python 3) Освоение основных элементов функциональной парадигмы программирования (функции, операторы, рекурсия и т. д.) в синтаксисе Python 4) Овладение навыками работы со вводом-выводом данных в Python и сочетанием Python с другим ПО молекулярного моделирования в различном окружении 5) Ознакомление с объектно-ориентированным подходом Python и библиотекой numpy для обработки данных молекулярного моделирования

Краткое содержание дисциплины

В рамках курса студенты знакомятся на примере языка Python с возможностями алгоритмизировать математические операции, структурировать и извлекать необходимую информацию, работать с базами данных, обрабатывать файлы и потоки -- все то, что может понадобиться при выполнении многочисленных задач молекулярного моделирования, для автоматизации рутинных операций в ходе него.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-5 Способен применять языки программирования для написания собственных программ для обработки структурированных текстовых и количественных данных для задач моделирования атомно-молекулярных систем	Знает: Синтаксис язык программирования Python Умеет: Применять язык программирования Python для написания оригинального программного обеспечения Имеет практический опыт: Обработки структурированных текстовых и количественных данных для молекулярного моделирования

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Нет	Не предусмотрены

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 48,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		1
Общая трудоёмкость дисциплины	144	144
<i>Аудиторные занятия:</i>	32	32
Лекции (Л)	0	0
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	32	32
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	95,5	95,5
Подготовка к экзамену	15,5	15,5
Подготовка к контрольному мероприятию №4, функции и функциональный подход в программировании. Встроенные функции Python.	15	15
Подготовка к контрольному мероприятию №3, структурная парадигма Python.	10	10
Подготовка к контрольному мероприятию №2 по освоению последовательностей и циклов в языке Python	15	15
Подготовка к контрольному мероприятию №6, библиотека numpy	15	15
Подготовка к контрольному мероприятию №5, ООП	15	15
Подготовка к контрольному мероприятию №1 по освоению синтаксиса Python	10	10
Консультации и промежуточная аттестация	16,5	16,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Введение в Python. Способы обращения к интерпретатору. Числа и переменные.	2	0	0	2
2	Строковый тип данных. Способы ввода-вывода.	2	0	0	2
3	Списки и циклы в Python	4	0	0	4
4	Множества и кортежи в Python	2	0	0	2
5	Словари в Python	2	0	0	2
6	Структурная парадигма программирования в Python	4	0	0	4
7	Функции и способы их задания	2	0	0	2
8	Функциональная парадигма программирования в Python	4	0	0	4
9	Объектно-ориентированный подход. Классы Python	6	0	0	6
10	Библиотека numpy для ускоренных вычислений	4	0	0	4

5.1. Лекции

Не предусмотрены

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	1	Введение в Python. Переменные и числовые операции.	2
2	2	Строковый тип данных в Python	2
3	3	Списки и циклы в Python	2
4	3	Списки и циклы при работе с файлами	2
5	4	Множества и кортежи в Python	2
6	5	Словари в Python	2
7	6	Структурный подход в программировании. Расширенные возможности использования циклов и операторов в Python	2
8	6	Рекурсия в Python	2
9	7	Функции и генераторы в Python	2
10	8	Безымянная функция lambda и ее применение.	2
11	8	Функциональный стиль Python	2
12	9	Возможности ООП в Python: введение	2
13	9	Создание программ для обработки файлов молекулярного моделирования с применением ООП, часть 1	2
14	9	Создание программ для обработки файлов молекулярного моделирования с применением ООП, часть 2	2
15	10	Возможности библиотеки numpy: введение	2
16	10	Использование библиотеки numpy для обработки файлов: практическое занятие	2

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС	
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс
Подготовка к экзамену	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 1-6; Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 1-8
Подготовка к контрольному мероприятию №4, функции и функциональный подход в программировании. Встроенные функции Python.	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6530075/mod_resource/content/1/lecture_python_5.pdf Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 3.2; Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 16; Макарова Т. М. Программирование на языке Python, ЛР №4
Подготовка к контрольному мероприятию №3,	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 6; Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 6-8; 13-15; Макарова Т. М. Программирование на языке Python, ЛР №3

структурная парадигма Python.	
Подготовка к контрольному мероприятию №2 по освоению последовательностей и циклов в языке Python	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 3.1; Макарова Т. М. Программирование на языке Python, ЛР №2
Подготовка к контрольному мероприятию №6, библиотека numpy	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 4
Подготовка к контрольному мероприятию №5, ООП	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/9961373/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf Б.Мейер "Почувствуй класс", гл. 4-6
Подготовка к контрольному мероприятию №1 по освоению синтаксиса Python	Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 1-5; Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 1-2; Макарова Т. М. Программирование на языке Python, ЛР №1

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	1	Текущий контроль	Типы данных в Python	1	5	За каждую из первых трех корректно выполненных задач начисляется по 1 баллу, за последнюю -- 2 балла. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя задержки сдачи оценивается в -0,5 баллов.	экзамен
2	1	Текущий контроль	Списки и циклы в Python	1	5	Первая задача оценивается в 0,5 баллов, последующие -- по 1,5 балла, каждая неделя задержки сдачи оценивается в -0,5 баллов. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов.	экзамен
3	1	Текущий	Структурная	1	5	Необходимо написать целостную	экзамен

		контроль	парадигма в Python.			программу из 3 больших этапов. Первый этап оценивается в 1 баллов, два последующих --- в 2 балла. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	
4	1	Текущий контроль	Функциональная парадигма Python	1	5	Необходимо написать целостную программу из 3 больших этапов. Первый этап оценивается в 1 баллов, два последующих --- в 2 балла. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	экзамен
5	1	Текущий контроль	Классы и ООП в Python	1	5	Необходимо написать программу с созданием класса, в котором содержатся атрибуты, функции и методы класса, для решения задачи обработки данных молекулярного моделирования. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	экзамен
6	1	Текущий контроль	Библиотека numpy Python для работы с массивами данных	1	5	Правильно решенная и вовремя сданная задача оценивается в 5 баллов. За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов. Каждая неделя просрочки задания также оценивается в -0,5 баллов.	экзамен
8	1	Промежуточная аттестация	Экзаменационная задача	-	10	Критерии, из которых складывается оценка: Корректный ввод-вывод данных из файла -- 1 балл, корректный разбор командной строки -- 1 балл, корректное использование циклов и ветвлений -- 1 балл, корректное обращение со сложными структурами данных (разноуровневые списки, соблюдение форматов данных) -- 1 балл, грамотное использование ООП -- 2	экзамен

					балла, грамотное использование элементов функционального стиля и/или встроенных библиотек Python -- 2 балла, вовремя сданная задача (без пересдачи) -- 2 балла. За каждую ошибку, изменяющую результат работы задачи или делающую ее частным случаем поставленной проблемы, снимается по 0,5 баллов. За неоптимальность работы кода баллы не снимаются.	
--	--	--	--	--	--	--

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Оценивание учебной деятельности по дисциплине происходит на основании полученных баллов за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Для повышения своего рейтинга студент вправе пройти процедуру экзамена. Студенты выполняют индивидуальную зачетную задачу, содержащую в себе чтение данных из файла, преобразование извлеченной информации и запись в новый файл с соблюдением формата.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ						
		1	2	3	4	5	6	8
ПК-5	Знает: Синтаксис язык программирования Python	+	+	+				+
ПК-5	Умеет: Применять язык программирования Python для написания оригинального программного обеспечения	+	+	+	+	+		+
ПК-5	Имеет практический опыт: Обработки структурированных текстовых и количественных данных для молекулярного моделирования				+	+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

- Макарова Т. М. Программирование на языке Python : метод. указания к дисциплине для студентов хим. направлений подготовки проектного обучения (магистратура) / Т. М. Макарова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск : Издательский центр ЮУрГУ, 2022. - 33, [2] с. : ил.

б) дополнительная литература:

1. Златопольский, Д. М. Основы программирования на языке Python [Текст] учебник Д. М. Златопольский. - 2-е изд. - М.: ДМК ПРЕСС, 2018. - 394, [1] с. ил.

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:
Не предусмотрены

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Б.Мейер "Почувствуй класс". Перевод с английского под ред. к.т.н. В.А. Биллига

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Б.Мейер "Почувствуй класс". Перевод с английского под ред. к.т.н. В.А. Биллига

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Маккинни, У. Python и анализ данных / У. Маккинни ; перевод с английского А. А. Слинкина. — 2-ое изд., испр. и доп. — Москва : ДМК Пресс, 2020. — 540 с. — ISBN 978-5-97060-590-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/131721
2	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Златопольский, Д. М. Основы программирования на языке Python / Д. М. Златопольский. — 2-ое изд., испр. и доп. — Москва : ДМК Пресс, 2018. — 396 с. — ISBN 978-5-97060-641-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. https://e.lanbook.com/book/131683

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. Python Software Foundation-Python (бессрочно)
3. -Python(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Нет

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
	208 (1а)	Персональные компьютеры, проектор
	207	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, 18

	(1a)	ядер
--	------	------