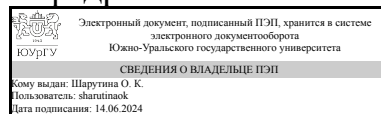


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Заведующий выпускающей  
кафедрой



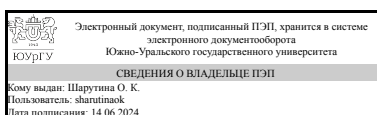
О. К. Шарутина

## 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

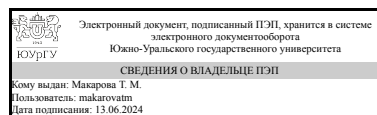
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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<br>Умеет: Применять язык программирования Python для написания оригинального программного обеспечения<br>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. | <a href="https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6530075/mod_resource/content/1/lecture_python_5.pdf">https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6530075/mod_resource/content/1/lecture_python_5.pdf</a><br>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                                                    | <a href="https://edu.susu.ru/pluginfile.php/9961373/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf">https://edu.susu.ru/pluginfile.php/9961373/mod_resource/content/1/lecture_python_6.pdf</a><br>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;<br>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-<br>местр | Вид<br>контроля  | Название<br>контрольного<br>мероприятия | Вес | Макс.<br>балл | Порядок начисления баллов                                                                                                                                                                                                                                                                      | Учи-<br>тыва-<br>ется в<br>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.<br>За каждую ошибку, искажающую результат программы или делающую ее решением частного случая задачи, снимается по 0,5 баллов.<br>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.<br>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.<br><br>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:<br><br>Корректный ввод-вывод данных из файла -- 1 балл,<br>корректный разбор командной строки -- 1 балл,<br>корректное использование циклов и ветвлений -- 1 балл,<br>корректное обращение со сложными структурами данных (разноуровневые списки, соблюдение форматов данных) -- 1 балл,<br>грамотное использование ООП -- 2        | экзамен |

|  |  |  |  |  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |  |
|--|--|--|--|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
|  |  |  |  |  | балла,<br>грамотное использование элементов функционального стиля и/или встроенных библиотек Python -- 2 балла,<br>вовремя сданная задача (без пересдачи) -- 2 балла.<br><br>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 |
| 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. <a href="https://e.lanbook.com/book/131721">https://e.lanbook.com/book/131721</a> |
| 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. <a href="https://e.lanbook.com/book/131683">https://e.lanbook.com/book/131683</a>       |

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 |
|--|------|------|