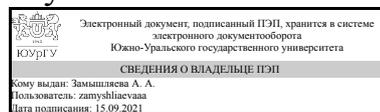


УТВЕРЖДАЮ  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



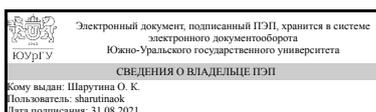
А. А. Замышляева

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
**практики**

**Практика** Учебная практика, ознакомительная практика  
для направления 04.04.01 Химия  
**Уровень** Магистратура  
**магистерская программа** Хемоинформатика  
**форма обучения** очная  
**кафедра-разработчик** Теоретическая и прикладная химия

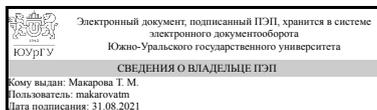
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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



О. К. Шарутина

Разработчик программы,  
к.хим.н., доцент



Т. М. Макарова

# 1. Общая характеристика

## Вид практики

Учебная

## Тип практики

ознакомительная

## Форма проведения

Дискретно по видам практик

## Цель практики

Целью практики является получения навыков применять различные языки программирования для написания собственных программ для обработки структурированных текстовых и количественных данных для задач моделирования атомно-молекулярных систем

## Задачи практики

Задачами практики являются:

- 1) Написание плана выполнения процедур для молекулярно-динамического моделирования системы
- 2) Знакомство с языком скриптования bash
- 3) Знакомство с языком потоковой обработки данных awk
- 4) Знакомство с возможностями языка Python по управлению процессами

## Краткое содержание практики

Дисциплина изучается в рамках программы проектного обучения "Моделирование структуры и свойств кристаллических и гибридных наноматериалов", рассчитанного на 2 года магистратуры. В рамках дисциплины студенты учатся планировать молекулярно-динамические расчеты и писать собственные алгоритмы и ПО для их осуществления.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения практики

Планируемые результаты освоения ОП ВО	Планируемые результаты обучения при прохождении практики
ПК-5 Способен применять языки программирования для написания собственных программ для обработки структурированных текстовых и количественных данных для задач моделирования атомно-молекулярных	Знает: Особенности функционального стиля языков общего профиля
	Умеет: Создавать скрипты для автоматизации вычислительных процессов
	Имеет практический опыт: Настройке

### 3. Место практики в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Программирование на языке Python для химиков: проектное обучение	

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым для прохождения данной практики и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Программирование на языке Python для химиков: проектное обучение	Знает: Синтаксис язык программирования Python Умеет: Применять язык программирования Python для написания собственных программ Имеет практический опыт: Обработки структурированных текстовых данных для молекулярного моделирования

### 4. Объём практики

Общая трудоемкость практики составляет зачетных единиц 3, часов 108, недель 2.

### 5. Содержание практики

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ на практике	Кол-во часов
1	Подготовка плана работы над задачей молекулярно-механического моделирования	30
2	Разработка алгоритмов и скриптов для выполнения отдельных задач молекулярно-механического моделирования	35
3	Написание итогового скрипта для выполнения всей процедуры молекулярно-динамического моделирования и написание отчета по практике	43

### 6. Формы отчетности по практике

По окончании практики, студент предоставляет на кафедру пакет документов, который включает в себя:

- дневник прохождения практики, включая индивидуальное задание и характеристику работы практиканта организацией;
- отчет о прохождении практики.

Формы документов утверждены распоряжением заведующего кафедрой от 20.02.2017 №10.

## 7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся по практике

Вид промежуточной аттестации – дифференцированный зачет. Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

### 7.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Семестр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс.балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
3	2	Текущий контроль	Программа Python для распределенного выполнения процессов молекулярного моделирования	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно поставленной задаче. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	дифференцированный зачет
1	2	Текущий контроль	Скрипт awk для обработки структурного файла	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно поставленной задаче. За каждую ошибку, искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	дифференцированный зачет
2	2	Текущий контроль	Написание скрипта bash для запуска процесса отверждения полимера	1	5	5 баллов -- программа составлена верно и обрабатывает файл согласно поставленной задаче. За каждую ошибку,	дифференцированный зачет

						искажающую результат работы программы, снимается по 1 баллу.	
4	2	Промежуточная аттестация	Отчет по учебной практике	1	5	<p>Критерии оценки: 5 баллов: Задание на практику выполнено полностью. Отчет оформлен в соответствии с требованиями, верно указаны все параметры оборудования, с которыми студент ознакомлен. 4 балла: Задание на практику выполнено полностью. Отчет содержит некоторые ошибки или неточности в представлении результата. 3 балла: Задание на практику выполнено не полностью, либо в значительной части отсутствует в отчете. Не заполнены или неправильно заполнены целые разделы отчета. 2 балла: Задание на практику не выполнено. Отчет отсутствует.</p>	дифференцированный зачет

## 7.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Промежуточная аттестация (дифференцированный зачет) происходит в виде написания отчета по учебной практике. Суммарный рейтинг, в соответствии с которым выставляется оценка, на 60% состоит из баллов за задания текущего контроля и на 40% - из оценки за предоставленный отчет.

### 7.3. Оценочные материалы

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ			
		1	2	3	4
ПК-5	Знает: Особенности функционального стиля языков общего профиля	+	+		+
ПК-5	Умеет: Создавать скрипты для автоматизации вычислительных процессов		+	+	+
ПК-5	Имеет практический опыт: Настройке параллельных вычислительных процессов			+	+

Фонды оценочных средств по каждому контрольному мероприятию находятся в приложениях.

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение практики

### Печатная учебно-методическая документация

а) *основная литература:*

Не предусмотрена

б) *дополнительная литература:*

Не предусмотрена

*из них методические указания для самостоятельной работы студента:*

1. Д.Б.Слоуз, А.Д. Роббинс и др. Справочник по AWK

### Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование разработки	Наименование ресурса в электронной форме	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
1	Дополнительная литература	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. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/131683">https://e.lanbook.com/book/131683</a>	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный
2	Основная литература	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 :	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный

	электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/131721">https://e.lanbook.com/book/131721</a>		
--	---	--	--

## 9. Информационные технологии, используемые при проведении практики

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -Python(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

Нет

## 10. Материально-техническое обеспечение практики

Место прохождения практики	Адрес места прохождения	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, обеспечивающие прохождение практики
Научно-образовательный центр "Нанотехнологии" ЮУрГУ	454080, Челябинск, Ленина, 76	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, персональные компьютеры, проектор