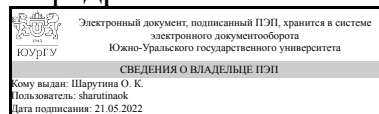


УТВЕРЖДАЮ:
Заведующий выпускающей
кафедрой



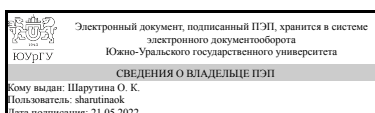
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.Ф.М2.04.01 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

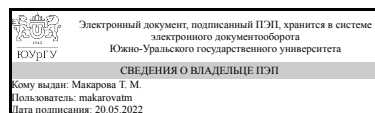
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

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) Основы работы с файлами и вводом-выводом данных в синтаксисе Python в приложении к ПО молекулярного моделирования 5) Ознакомление с некоторыми библиотеками Python для обработки данных для 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., 32,5 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>	16	16	
Лекции (Л)	0	0	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	16	16	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	111,5	111,5	
с применением дистанционных образовательных технологий	0		
Подготовка к контрольному мероприятию №6, освоение новых библиотек Python	15	15	
Подготовка к контрольному мероприятию №2 по освоению последовательностей и циклов в языке Python	15	15	
Подготовка к контрольному мероприятию №4, овладение императивным (структурным) подходом в программировании на Python	15	15	
Подготовка к экзамену	21,5	21.5	
Подготовка к контрольному мероприятию №5, функции и функциональный подход в программировании. Встроенные функции Python.	15	15	
Подготовка к контрольному мероприятию №1 по освоению синтаксиса Python	15	15	
Подготовка к контрольному мероприятию №3, освоение возможностей ввода и вывода в Python.	15	15	
Консультации и промежуточная аттестация	18,5	18,5	
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. Основные команды и типы данных.	2	0	0	2
2	Списки и циклы в Python	2	0	0	2
3	Структурная парадигма программирования в Python	4	0	0	4
4	Функциональная парадигма программирования в Python	4	0	0	4
5	Дополнительные библиотеки Python	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. Основные команды и типы данных.	2
2	2	Списки и циклы в Python	2
3	3	Ввод и вывод данных в Python	2
4	3	Множества, кортежи, словари	2
5	4	Функции и генераторы	2
6	4	Функциональный стиль Python	2
7	5	Библиотеки для обработки больших массивов данных в Python	4

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС	
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс
Подготовка к контрольному мероприятию №6, освоение новых библиотек Python	Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 4-5
Подготовка к контрольному мероприятию №2 по освоению последовательностей и циклов в языке Python	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6054103/mod_resource/content/2/lecture_2_python.pdf Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 3.1
Подготовка к контрольному мероприятию №4, овладение императивным (структурным) подходом в программировании на Python	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6403734/mod_resource/content/1/lecture_python_4.pdf Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 6-8; 13-15
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 №5, функции и функциональный подход в программировании. Встроенные	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

функции Python.	
Подготовка к контрольному мероприятию №1 по освоению синтаксиса Python	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/5992129/mod_resource/content/3/lecture_1_python.pdf Златопольский Д. М. - Основы программирования на языке Python, гл. 1-5; Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 1-2
Подготовка к контрольному мероприятию №3, освоение возможностей ввода и вывода в Python.	https://edu.susu.ru/pluginfile.php/6282447/mod_resource/content/1/lecture_3_python.pdf Маккинни У. "Python и анализ данных", гл. 6

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-мestr	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учи-тыва-ется 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 контроль	Ввод и вывод в Python. Словари и кортежи.	1	5	Первая задача оценивается в 0,5 баллов, вторая задача --- в 1 балл, третья задача --- в 1,5 балла, четвертая --- 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.	экзамен

4	1	Текущий контроль	Функции и генераторы Python	1	5	<p>За правильное выполнение первой задачи начисляется 1 балл, второй -- также 1 балл, а за последнюю в сумме -- 3 балла, причем:</p> <ul style="list-style-type: none"> - за функцию и за генератор простых чисел -- по 0,5 баллов каждый - за функцию поиска множителей -- 2 балла <p>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.</p>	экзамен
5	1	Текущий контроль	Функциональный стиль и встроенные функции Python	1	5	<p>За первое задания с разбором файла начисляется 3 балла, причем по одному баллу начисляется за: разбор командной строки; чтение из файла; корректную запись в файл с соблюдением формата. Второе и третье задание также оцениваются по 1 баллу, соответственно.</p> <p>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.</p>	экзамен
6	1	Текущий контроль	Библиотеки Python для работы с массивами данных	1	5	<p>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.</p>	экзамен
8	1	Промежуточная аттестация	Экзаменационная задача	-	10	<p>Критерии, из которых складывается оценка:</p> <ul style="list-style-type: none"> Корректный ввод данных из файла -- 1 балл, корректный вывод данных в файл -- 1 балл, корректный разбор командной строки - 1 балл, корректное использование циклов и ветвлений -- 1 балла, корректное обращение со сложными структурами данных (разноуровневые списки, соблюдение форматов данных) -- 2 балла, грамотное использование элементов функционального стиля и/или 	экзамен

					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:

- Бродин, В. Б. Микропроцессор i 486. Архитектура, программирование, интерфейс. - М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 1993. - 238,[2] с. ил.

б) дополнительная литература:

- 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. Методические указания к дисциплине «Программирование на языке Python для химиков: проектное обучение»

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Методические указания к дисциплине «Программирование на языке Python для химиков: проектное обучение»

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. Python Software Foundation-Python (бессрочно)
2. -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 (1а)	Локальный вычислительный комплекс на процессорах CPU Intel Xeon E5-2697, 18 ядер