

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«25» сентября 2025г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Вар – Математическое моделирование кристаллических структур

Уровень высшего образования:
бакалавриат

Направление подготовки/ специальность:
05.03.01 Геология

Профиль программы бакалавриата:
Геохимия

Форма обучения:
Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № 6 от 08 сентября 2025 г.)

Москва 2025

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 05.03.01 Геология, утвержденным приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции).

Год приема на обучение: 2023

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины:

Цели дисциплины Математическое моделирование кристаллических структур:

- ознакомление студентов с одним из самых доступных языков программирования на данный момент, демонстрация доступности и эффективности применения современных языков программирования в качестве инструмента при решении кристаллохимических задач, которые могут возникнуть у исследователя в процессе его будущей научной деятельности.

Задачи дисциплины Математическое моделирование кристаллических структур:

- обучение базовым навыкам прикладного программирования;
- получение навыков составления математических алгоритмов и реализации их в программном коде;
- формирование представления о создании и работе счётно-моделирующих программ; приобретение навыков проведения автоматизированных вычислений при проведении исследований,
- обучение использованию Python 3 как инструмента при решении конкретных вычислительных задач.

Краткое содержание дисциплины (аннотация)

Разбиения кристаллического пространства. Основные способы. Разбиения в обратном пространстве. Зоны Бриллюэна. Язык Python. Основные операции, типы данных, ввод-вывод, циклы, условия, создание и использование функции, битовые операции, импорт библиотек. Базовые команды. Битовые операции. Типы данных. Импорт библиотек. Процедуры ввода-вывода. Создание python файла. Синтаксис python. Логические условия. Циклы. Функции. Строки, регулярные выражения, списки, кортежи, словари, множества, собственные модули, работа с файлами. Debug режим (отладка, профилирование). Строки. Строки – операции. Строки – форматирование. Регулярные выражения. Списки. Структурированная работа с большим объёмом данных, словари. Кортежи. Множества. Файлы. Структуры и файлы: бинарные файлы (pickle), строковые структуры (json), исключения, менеджер контекста, лямбда функции, создание и подключение модулей, баты и байтовые массивы. Отладка и исключения. Многомодульность. Консоль Windows, bat-скрипты, функциональное программирование, map, reduce, zip, filter, all, any, декораторы, документирование, классы (наследование, перегрузка, инкапсуляция). Функциональное программирование. Документирование кода. Классы и объекты. Перегрузка операторов и полиморфизм. Выполнение основной задачи по курсу математического моделирования. Поиск пустот в ячейке кристаллической структуры в соответствии с заданными условиями

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО - относится к вариативной части

ОПОП, является дисциплиной по выбору

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия: Её освоение базируется на курсах блоков общенаучной подготовки базовой и вариативной части, входящих в модули Общая Геология, Физика, Высшая математика и Химия, а также на дисциплине «Кристаллография» и «Рабочее пространство кристаллохимика»

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы (показатели) достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
ОПК-1.Б. Способен применять знания фундаментальных разделов наук о Земле, базовые знания естественно-научного и математического циклов при решении стандартных профессиональных задач.	Б.ОПК-1. И-1. Использует базовые знания фундаментальных разделов математических и естественных наук в профессиональной деятельности Б.ОПК-1. И-2. Использует базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле в профессиональной деятельности	Знать: программный продукт Python3 и границы его применимости для решения конкретных задач прикладного программирования.
ОПК-2.Б. Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.	Б.ОПК-3. И-1. Использует типовые подходы и методы при решении задач профессиональной деятельности. Б.ОПК-3. И-2. Владеет базовыми навыками получения информации (полевой, камеральной, лабораторной) для решения стандартных задач профессиональной деятельности в	Владеть: современными методами создания программных продуктов для решения кристаллохимических задач, алгоритмами создания программ - визуализаторов кристаллических структур.

	соответствии с профилем подготовки. Б.ОПК-3. И-3. Владеет базовыми навыками обработки и интерпретации информации при решении стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.	
Б.СПК-1.Способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации в области наук геохимического цикла (формируется частично).	Б.СПК-1. И-1. Владеет методами поиска и анализа информации в области наук геохимического цикла, в том числе – с применением современных информационно-коммуникационных технологий. Б.СПК-1. И-2. Владеет навыками систематизации и интерпретации данных в области наук геохимического цикла.	Уметь: создавать свою собственную творческую программную среду на языке Python3 для решения конкретных задач кристаллографии и кристаллохимии

4. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 з.е., в том числе, 28 академических часов, отведенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (14 часов – занятия лекционного типа, 14 часов – занятия семинарского типа, 80 часов на самостоятельную работу обучающихся). Форма промежуточной аттестации – зачет.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и виды учебных занятий

№ п/ п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля (по неделям семестра) Форма
				Лекции	Семинары	Пр. занятия	Сам. подготовк а	

								промежуточно й аттестации
1	Разбиения прямого и обратного кристаллическог о пространства.	7	1-2	4			12	
2	Вводное занятие по алгоритмам	7	3	2			4	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
3	Знакомство с Python интерпретатором, основные операции, простые типы данных, системы счисления и битовые операции, ввод- вывод, синтаксис и создание скрипт-файлов	7	4		2		6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
4	Условия и логические операции, циклы, составные типы данных (списки, кортежи, словари, множества), импорт библиотек, debug режим	7	5	2			6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
5	Создание и использование функции, повторение пройденного, строки, дата и время	7	6		2		6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
6	Строки повторение, регулярные	7	7	2			4	Собеседование на каждом семинарском

	выражения, работа с файлами, менеджер контекста, бинарные файлы (pickle), строковые структуры (json), байты и байтовые массивы							занятии. Сдача персональных задач по списку.
7	Исключения (try- except), создание и подключение модулей, параметры функции, временные функции, параметры командной строки, консоль Windows, bat- скрипты	7	8		2		6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
8	Функциональное программировани е (map, reduce, zip, filter, all, any)	7	9	2			6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
9	Декораторы, документировани е, классы (наследование, перегрузка, инкапсуляция)	7	10		2		6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных 2задач по списку.
10	Plot и графический интерфейс	7	11	2			6	Собеседование на каждом семинарском занятии. Сдача персональных задач по списку.
11	Решение персональной задачи на счет	7	12		2		6	Проверка решения персональной задачи

12	Решение задачи на моделирование пустот	7	13-14		4		12	Демонстрация созданного программного кода
Всего часов 108 часов				14	14		80	Зачет

Содержание разделов дисциплины

- 1) Разбиения кристаллического пространства. Основные способы.
- 2) Разбиения в обратном пространстве. Зоны Бриллюэна.
- 3) Язык Python. Основные операции, типы данных, ввод-вывод, циклы, условия, создание и использование функции, битовые операции, импорт библиотек.
- 4) Базовые команды языка Python. Битовые операции. Типы данных. Импорт библиотек. Процедуры ввода-вывода.
- 5) Создание python файла. Синтаксис python. Логические условия. Циклы. Функции. Строки, регулярные выражения, списки, кортежи, словари, множества, собственные модули, работа с файлами.
- 6) Debug режим (отладка, профилирование). Строки. Строки – операции. Строки – форматирование. Регулярные выражения. Списки.
- 7) Структурированная работа с большим объёмом данных, словари. Кортежи. Множества. Файлы. Структуры и файлы: бинарные файлы (pickle), строковые структуры (json), исключения, менеджер контекста, лямбда функции, создание и подключение модулей, баты и байтовые массивы.
- 8) Отладка и исключения. Многомодульность. Консоль Windows, bat-скрипты, функциональное программирование, map, reduce, zip, filter, all, any, декораторы, документирование, классы (наследование, перегрузка, инкапсуляция).
- 9) Функциональное программирование. Документирование кода.
- 10) Классы и объекты. Перегрузка операторов и полиморфизм.
- 11) Выполнение основной задачи по курсу математического моделирования .Поиск пустот в ячейке кристаллической структуры в соответствии с заданными условиями.

6. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

6.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий и устной проверки

усвоения материала. Для проверки результатов самостоятельной работы используется система дистанционной подготовки по программированию. Для группы создаётся пространство, подбираются задачи по пройденным темам, осуществляется текущий рейтинговый контроль успеваемости студентов (рис. 1). Рейтинговый контроль осуществляется по балльной системе, а подсчёт и визуализация результатов осуществляется с помощью созданного и развернутого серверного приложения (рис. 1). При этом предлагаются задачи 3-х видов: обязательные (1 балл), дополнительные (1,5 балла) и усложнённые (3,5 балла). Для получения промежуточного зачёта и допуска к решению итоговой кристаллохимической задачи необходимо было сдать все обязательные задачи и суммарно набрать более 60 баллов.

Контрольные вопросы по курсу для текущего контроля:

Задачи для практики

Обязательные (1 балл):

- 2937 – ввод-вывод
- 2938 – яблоки
- 338 – цифры в обратном порядке
- 74 – $a+b$
- 596 – пробежка
- 595 – диета
- 2944 – сумма цифр
- 2949 – обмен значений
- 315 – сумма квадратов
- 120 – сумма и факториалы
- 334 – остаток
- 1476 – часовая стрелка
- 341 – делители числа
- 115 – количество нулей
- 3064 – длина последовательности

Дополнительно (1,5 балла):

- 597 – пробежка 2
- 2940 – мкад
- 2945 – четное число
- 2951 – пирожки
- 2955 – улитка
- 352 – степень
- 335 – полные квадраты
- 1433 – кролики

Особые (3,5 балла):

- 248 – шахматные слоны
- 2950 – расписание

- 2967 – найти значение
- 2957 – делимость
- 2958 - максимум
- 321 – сложная сумма

Домашние задания для самостоятельной подготовки студентов.

Задачи на дом:

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1d5UjabePXB9QpW2oTY6QtUkjin7NDMgBMvQzpkW_ccZ0/edit#gid=258125635

6.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

- 1) Разбиения кристаллического пространства. Основные способы.
- 2) Разбиения в обратном пространстве. Зоны Бриллюэна.
- 3) Язык Python. Основные операции, типы данных, ввод-вывод, циклы, условия, создание и использование функции, битовые операции, импорт библиотек.
- 4) Базовые команды языка Python. Битовые операции. Типы данных. Импорт библиотек. Процедуры ввода-вывода.
- 5) Создание python файла. Синтаксис python. Логические условия. Циклы. Функции. Строки, регулярные выражения, списки, кортежи, словари, множества, собственные модули, работа с файлами.
- 6) Debug режим (отладка, профилирование). Строки. Строки – операции. Строки – форматирование. Регулярные выражения. Списки.
- 7) Структурированная работа с большим объемом данных, словари. Кортежи. Множества. Файлы. Структуры и файлы: бинарные файлы (pickle), строковые структуры (json), исключения, менеджер контекста, лямбда функции, создание и подключение модулей, баты и байтовые массивы.
- 8) Отладка и исключения. Многомодульность. Консоль Windows, bat-скрипты, функциональное программирование, map, reduce, zip, filter, all, any, декораторы, документирование, классы (наследование, перегрузка, инкапсуляция).
- 9) Функциональное программирование. Документирование кода.
- 10) Классы и объекты. Перегрузка операторов и полиморфизм.
- 11) Выполнение основной задачи по курсу математического моделирования. Поиск пустот в ячейке кристаллической структуры в соответствии с заданными условиями.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине (зачет).

Оценка результатов обучения, <i>соответствующие виды оценочных средств</i>	Незачет	Зачет
Знания: программного продукта Python3 и границ его применимости для решения конкретных задач прикладного	Фрагментарные знания или отсутствие знаний	Систематические знания

программирования		
Умение: создавать свою собственную творческую программную среду на языке Python3 для решения конкретных задач кристаллографии и кристаллохимии.	В целом успешное, но не систематическое умение или отсутствие умений	Успешное использование полученных знаний для описания структур
Владение современными методами создания программных продуктов для решения кристаллохимических задач, алгоритмами создания программ - визуализаторов кристаллических структур.	Наличие отдельных навыков или отсутствие навыков	Успешное использование полученных знаний для описания кристаллических структур

7. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы

Основная литература

1) Еремин Н.Н. Еремина Т.А. Неорганическая кристаллохимия. Книга 1. 2018 г. Москва, КДУ.

2) <https://www.python.org/doc/> Документация по Python

Дополнительная литература

1) Кузьмина Н.А., Муромцев Н.А. и др. (2016) Теоретический кристаллохимический анализ пустот в кристаллических структурах полиморфных модификаций Nb_5Si_3 // сборник тезисов VIII Всероссийской молодежной научной конференции «Минералы: строение, свойства, методы исследования», Екатеринбург, с. 100-101.

2) Муромцев Н.А., Еремин Н.Н. и др. (2018) Кристаллохимический анализ путей диффузии актиноидов в структурах монацитов легких редких земель // сборник тезисов IX Всероссийской конференции «Минералы: строение, свойства, методы исследования», Екатеринбург, с. 135-136

Б) Перечень программного обеспечения:

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

Г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы

<http://cryst.geol.msu.ru/courses/matmod/> - официальная страница курса;

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1d5UjabePXB9QpW2oTY6QtUkjin7NDMgBMvQzpkW_ccZ0/edit#gid=258125635 - список домашних заданий

<https://www.python.org/downloads/> Python интерпретатор -

<https://www.anaconda.com/download/> Коллекция библиотек -

<https://www.jetbrains.com/pycharm/download/> IDE среда для разработки -

Д) Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий: интерактивных лекций-визуализаций, презентаций рефератов на семинарах – используется LCD проектор.

Для самостоятельной работы студентов используется компьютерный класс с выходом в Интернет, коллекция кристаллических структур кафедры кристаллографии и кристаллохимии, доступная через учебный кабинет кафедры, доступ с базам данным по кристаллохимии и структурным данным, программное обеспечение для решения задач кристаллохимических задач, библиотека геологического факультета МГУ. Для самоподготовки используется компьютер с выходом в Интернет

8. Язык преподавания – русский

9. Преподаватель – Марченко Е.И.

10. Разработчики программы профессор Н.Н.Еремин