

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Введение в суперкомпьютерное моделирование физических процессов
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 45 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: А.В. Тимофеев, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании Физтех-кластера академической и научной карьеры 28.01.2022

Аннотация

Курс посвящён знакомству с основами моделирования и основам работы с высокопроизводительными вычислительными кластерами. Рассматривается моделирование методом молекулярной динамики, методом Монте-Карло и другими. Особое внимание в курсе уделяется практике моделирования и практике использования суперкомпьютеров для моделирования физических процессов и базовых биофизических процессов.

В рамках первой части курса рассматриваются основы методов молекулярного моделирования с акцентом на методе молекулярной динамики и Монте-Карло с элементами многомасштабного моделирования, а также рассматриваются технологии высокопроизводительных вычислений для ускорения расчётов.

Часть курса о моделировании основана на базовых понятиях механики, термодинамики и статистической физики. Рассматриваются все этапы моделирования – от постановки задачи до анализа результатов. В рамках курса студенты познакомятся с методами моделирования нейтральных систем и систем частиц с зарядами, отдельных кластеров атомов и кристаллов, равновесных, релаксационных и неравновесных процессов. После освоения этого курса возможно приступить к работе над научной задачей, для решения которой используется метод классической молекулярной динамики.

В рамках второй части курса о высокопроизводительных вычислениях кроме основ работы на современных суперкомпьютерах рассматриваются принципы распараллеливания и способы ускорения расчётов и популярные технологии распараллеливания и ускорения вычислений: технология MPI - для распараллеливания на системах с разделённой памятью, технологии Posix Threads, OpenMP, автоматическое распараллеливание для систем с общей памятью, технологии CUDA, OpenACC, OpenMP – для ускорения расчётов на графических ускорителях.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

изучение основных методов моделирования в физике конденсированного состояния с акцентом на методе молекулярной динамики, а также освоение основ технологий высокопроизводительных вычислений.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний в области молекулярного моделирования;
- приобретение теоретических знаний в области компьютерной физики;
- изучение простейших методов решения уравнений компьютерной физики и постановки задач численного моделирования физических явлений;
- ознакомление с предметом, принципами и методами высокопроизводительных вычислений;
- приобретение практических умений и навыков, необходимых для работы с многопроцессорными вычислительными системами;
- формирование умений и навыков для применения полученных знаний для решения ресурсоёмких вычислительных задач на многопроцессорных вычислительных системах.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности

ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы метода молекулярной динамики и метода Монте Карло;
- теоретические модели основополагающих процессов и явлений в молекулярной физике и ее приложениях;
- фундаментальные понятия, законы, теории классической равновесной и неравновесной статистической физики;
- порядки физических величин, характерные для классической молекулярной физики конденсированных сред;
- физические основы классических методов исследования структуры и свойств конденсированных фаз;
- теоретические основы параллельных алгоритмов;
- основные современные технологии параллельного программирования;
- основы технологий распараллеливания MPI, OpenMP, CUDA и др.

уметь:

- провести атомистическое моделирование выбранными вычислительными методами, сделать выводы из результатов моделирования;
- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических сред и процессов в них;
- пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- осваивать новые предметные области и теоретические подходы;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.
- проводить оптимизация и распараллеливание расчетов;
- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических ситуаций;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками грамотной обработки результатов компьютерных экспериментов и сопоставления с теоретическими данными.
- навыками компиляции программ эффективной для скорости выполнения;
- навыками работы на суперкомпьютере, включая работу с терминалом, запуск последовательных и параллельных программ с использованием систем очередей;
- навыками распараллеливания программ для вычислительных систем с общей памятью, с разделённой памятью и для графических ускорителей.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в моделирование и суперкомпьютерное моделирование	2			4
2	Базовые понятия основных методов моделирования	2			4
3	Основы молекулярной динамики – часть 1	2	2		4
4	Основы молекулярной динамики – часть 2	2	1		4
5	Термостаты	2	1		4
6	Равновесные свойства молекулярно-динамических моделей	2	1		4
7	Неравновесные свойства молекулярно-динамических моделей	2	1		4
8	Фазовые переходы	2	1		4
9	Основы работы с суперкомпьютерами	2	1		4
10	Компиляция и запуск программ	2	1		4
11	Введение в основы программирования на системах с общей памятью	2	2		4
12	Введение в основы программирования на системах с разделённой памятью	2	1		4

13	Введение в основы программирования на системах с графическими ускорителями – часть 1	2	1		4
14	Введение в основы программирования на системах с графическими ускорителями – часть 2	2	1		4
15	Использование программных пакетов	2	1		4
Итого часов		30	15		60
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Введение в моделирование и суперкомпьютерное моделирование

Вводная лекция. Эволюция атомистических представлений от Демокрита до середины 1950-х годов. Место атомистических представлений в науке двадцать первого века. Замысел атомистического моделирования. Классический метод молекулярной динамики. Примеры. Квантовое моделирование. Суперкомпьютеры. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование.

2. Базовые понятия основных методов моделирования

Введение в метод молекулярной динамики, описание основных направлений применения. Введение в другие методы моделирования. Описание многомасштабного подхода.

3. Основы молекулярной динамики – часть 1

Техника ММД. Численное интегрирование уравнений движения. Межчастичное взаимодействие. Граничные условия: периодические условия для однородных систем, поверхность, кластеры, биомолекулы и др. Начальные условия в стационарном и нестационарных случаях. Выбор шага интегрирования (ограничения сверху по сохранению полной энергии, по крутизне потенциала взаимодействия, частотные ограничения), переменный шаг. Флуктуации полной энергии.

4. Основы молекулярной динамики – часть 2

Способы оптимизации МД расчёта (обрезка потенциала, гран.условия, списки и др.). Исследование равновесных систем, выход на равновесие, критерии равновесия. Релаксация. Управляемая молекулярная динамика. Компьютерный эксперимент: модель и диагностика.

5. Термостаты

Термостаты в молекулярной динамике: виды, плюсы, минусы. Модель одномерного маятника: распределение в фазовом пространстве для микроканонического и для канонического ансамбля. Доказательство схемы термостата Нозе. Модификация уравнений движения, предложенная Гувером. Цепи Нозе-Хувера.

6. Равновесные свойства молекулярно-динамических моделей

Фундаментальные соотношения (первые принципы), используемые при диагностике: статистическая сумма, конфигурационный интеграл, строгие выражения для энергии, давления, теплоёмкости, тензора упругих напряжений и пр.; формулы Кубо-Грина и Эйнштейна-Гельфанда для коэффициентов диффузии, теплопроводности, вязкости и пр. Замена усреднения по фазовому пространству усреднением по времени. Пространственные и временные корреляции частиц. Радиальные функции распределения, корреляционные функции, флуктуации, их спектры. Термодинамические свойства и корреляционные функции. Автокорреляционные функции. Пространственно-временные корреляции частиц, Фурье-образы. Динамический структурный фактор. Примеры для однородных фаз и двухфазных систем, локализация точки фазового перехода, поверхностное натяжение, фазовые переходы второго рода, кластеры и макромолекулы, наноструктуры и наноматериалы.

7. Неравновесные свойства молекулярно-динамических моделей

Особенности расчёта неравновесных моделей и неравновесных свойств. Диффузия, вязкость, теплопроводность. Примеры и точность.

8. Фазовые переходы

Фазовые переходы. Неоднородные системы. Выбор числа частиц определяет набор явлений и свойств, которые можно исследовать с помощью ММД.

9. Основы работы с суперкомпьютерами

Зачем нужны суперкомпьютеры? Задачи, требующие больших вычислений. Обзор рейтинга Top-500. Метод классической молекулярной динамики и Монте-Карло: история, область применения, преимуществ, недостатки, положение среди других вычислительных методов. Примеры актуальных задач физики конденсированного вещества и неидеальной плазмы с демонстрацией результатов МД моделирования.

10. Компиляция и запуск программ

Основы работы с Linux и командной строкой. Компиляция и запуск программ. Представление о работе компиляторов (для C/C++ - объектные файлы и библиотеки, заголовочные файлы, система сборки, зависимости). Текстовые редакторы (vim, ...). Обзор основных возможностей gnuplot. Использование скриптов.

11. Введение в основы программирования на системах с общей памятью

Введение в программирование на система с общей памятью. Поток. OpenMP. Принципы распараллеливания.

12. Введение в основы программирования на системах с разделённой памятью

Последовательная и параллельная модели программирования. Парадигмы параллельного программирования и соответствующие программные средства. Программная реализация MPI. Типовые схемы организации параллельных MPI-программ и их структура. Компиляция и запуск MPI-программ. Проблема поиска ошибок. Оценка производительности многопроцессорных вычислительных систем.

13. Введение в основы программирования на системах с графическими ускорителями – часть 1

Архитектура графических ускорителей. Основные технологии параллелизации на графических ускорителях: CUDA, OpenCL. Компиляции и запуск программ. Синтаксис. Примеры.

14. Введение в основы программирования на системах с графическими ускорителями – часть 2

Основные полуавтоматизированные технологии параллелизации на графических ускорителях: OpenMP, OpenACC. Компиляции и запуск программ. Синтаксис. Примеры.

15. Использование программных пакетов

Популярные программные пакеты: BLAS, FFTW, LAMMPS, ... Компиляция, запуск, оценка эффективности.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Компьютеры, мультимедийное оборудование (проектор), экран, доступ к вычислительному кластеру, доска, мел или маркеры.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям [Текст] : [учебник для вузов] / Д. Френкель, Б. Смит ; пер. с англ. и науч. ред. В. А. Иванов, М. Р. Стукан .— М. : Научный мир, 2013 .— 578 с.
2. Современные языки и технологии параллельного программирования [Текст] : учеб. пособие для вузов / В. П. Гергель ; Б-ка Нижегород. гос. ун-та им. Н. И. Лобачевского .— М. : Изд-во Моск. ун-та, 2012 .— 408 с.
3. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. С. Антонов ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова .— М. : Изд-во Моск. ун-та, 2012 .— 344 с.

Дополнительная литература

1. Искусство молекулярной динамики [Текст] / Д. К. Рапапорт; пер. с англ. А. Н. Дьяконовой; под науч. ред. Р. Г. Ефремова - М.; ИжевскНИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2012
2. Технологии параллельного программирования [Текст] : учеб. пособие для вузов / С. А. Лупин, М. А. Посыпкин .— М. : Форум : Инфа-М, 2008 .— 205 с.
3. Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012 год, том 24, номер 6, стр. 3-44

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Базы данных по журналам Physical Review, J of Chemical Physics, ЖЭТФ, ТВТ, УФН и др.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. На практических занятиях используются компьютеры и вычислительный кластер (многопроцессорная и многоузловая система с графическими ускорителями и системой очередей) с возможностью удалённого доступа.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

1) Для записи лекций использовать тетради формата А4. Лекцию записывать только на правой стороне разворота. В тот же день прочитать свой конспект, дополнить по памяти пропущенные места и записать возникшие вопросы. При этом используется и левая сторона разворота тетради. На следующей лекции подойти к лектору со своими вопросами и внести его ответы в конспект. Наконец, обращайтесь к учебникам и монографиям, в частности, чтобы расширить материал лекций, дополняйте конспект. Дополнения к конспекту могут возникать в течение всего семестра вплоть до экзамена.

Обратите внимание на то, что такой же стиль конспектирования целесообразно распространить и на доклады, которые Вы будете слушать на конференциях, и на статьи, которые Вы будете читать.

2) Еженедельное активное общение с лектором имеет и психологическое значение: Вы учитесь общаться, излагать свои мысли, а лектор знакомится с Вами: Вы приобретаете репутацию в его глазах. Начинать вопросы надо с первой же лекции. С этой же целью садиться рекомендую в первые ряды: меньше будете отвлекаться во время лекции, а Ваше «рвение» будет замечено лектором. Опыт общения и репутация помогут Вам легче сдавать экзамены.

3) Настоятельно рекомендую выстраивать усвоенные знания в виде многоэтажного здания, когда последующие курсы предметов опираются на предыдущие. Особое внимание уделять взаимосвязям учебных предметов по мере их накопления; при этом полезно освежать знания, приобретенные в предыдущих семестрах. Ни в коем случае не рассматривать предметы как независимые друг от друга. Такой подход закрепляет полученные ранее знания и облегчает отличную учебу. В науке такой подход тоже имеет место, более того, становится магистральным и получил название multiscale approach. Является базовым подходом нашей программы.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау Физтех-кластер академической и научной карьеры (Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем)
курс:	1
квалификация:	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	А.В. Тимофеев, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.1 Формулирует в рамках обозначенной проблемы, цель, задачи, актуальность, значимость (научную, практическую, методическую и иную в зависимости от типа проекта), ожидаемые результаты и возможные сферы их применения
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.3 Владеет профессиональной терминологией, используемой в современной научно-технической литературе, обладает навыками устного и письменного изложения результатов научной деятельности в рамках профессиональной коммуникации
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.2 Способен применять знания в области физико-математических наук для решения поставленной задачи, формулирования выводов и оценки полученных результатов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Введение в суперкомпьютерное моделирование физических процессов» обучающийся должен:

знать:

- теоретические основы метода молекулярной динамики и метода Монте Карло;
- теоретические модели основополагающих процессов и явлений в молекулярной физике и ее приложениях;
- фундаментальные понятия, законы, теории классической равновесной и неравновесной статистической физики;
- порядки физических величин, характерные для классической молекулярной физики конденсированных сред;
- физические основы классических методов исследования структуры и свойств конденсированных фаз;
- теоретические основы параллельных алгоритмов;
- основные современные технологии параллельного программирования;
- основы технологий распараллеливания MPI, OpenMP, CUDA и др.

уметь:

- провести атомистическое моделирование выбранными вычислительными методами, сделать выводы из результатов моделирования;
- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических сред и процессов в них;
- пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- осваивать новые предметные области и теоретические подходы;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.
- проводить оптимизация и распараллеливание расчетов;
- абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических ситуаций;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками грамотной обработки результатов компьютерных экспериментов и сопоставления с теоретическими данными.
- навыками компиляции программ эффективной для скорости выполнения;
- навыками работы на суперкомпьютере, включая работу с терминалом, запуск последовательных и параллельных программ с использованием систем очередей;
- навыками распараллеливания программ для вычислительных систем с общей памятью, с разделённой памятью и для графических ускорителей.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Пример контрольного задания:

- Написать и оптимизировать программу для моделирования и анализа свойств:
 - 1) системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса
 - 2) системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Кулона

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов

1. Время динамической памяти. Замена усреднения по фазовому пространству усреднением по времени.
2. Подходы к расчету фазовых равновесий первого рода.
3. Виды диагностики при молекулярно-динамическом моделировании релаксации. Примеры.
4. Граничные условия. Их влияние на свойства системы.
5. Расходимость МД траекторий. Возникновение необратимости.

6. Методы оптимизации расчёта для дальнедействующих потенциалов (Ewald, PM, PPPM и др.). Суммы Эвальда.
7. Методы вычисления свободной энергии.
8. Близкодействующие и дальнедействующие потенциалы. Обрезка потенциала.
9. Обоснование моделирования через основы статистической механики.
10. Методы расчёта транспортных свойств.
11. Методы расчёта термодинамических величин.
12. Корреляционные функции.
13. Методы оценки структурных свойств системы. Радиальная функция распределения.
14. Термостаты в молекулярной динамике.
15. Развитие суперкомпьютеров и методов моделирования, перспективы.
16. Анализ масштабирования программы на вычислительном кластере.
17. Оптимизация работы программы на процессоре и графическом ускорителе.

Примеры контрольных заданий

1. Исследовать равновесные характеристики молекулярной системы (полученной в задании 1) в зависимости от шага dt интегрирования. Выбрать оптимальный шаг для исследуемой модели.
2. Выполнить моделирование нескольких систем разного размера (создать систему, привести её к равновесию, промоделировать равновесную систему). Определить минимальный размер системы, допустимый для моделирования.
3. Выполнить моделирование простой жидкости методом молекулярной динамики при разных температурах. Проанализировать траектории движения молекул и построить температурные характеристики важнейших величин: плотности вещества, теплоемкости, коэффициента самодиффузии, функций радиального распределения и других.
4. Провести сравнительный анализ свойств простых жидкостей при использовании различных потенциалов (Леннарда-Джонса, Букингема, Штокмайера и др.)
5. Разработать модель и выполнить оценку показателей ускорения и эффективности параллельных вычислений в рамках задачи моделирования простых жидкостей.

Примеры экзаменационных билетов

Билет 1.

1. Вопрос по выбору, связанный с моделированием системы частиц и ускорением её работы на суперкомпьютере.
2. Время динамической памяти. Замена усреднения по фазовому пространству усреднением по времени.
3. Какие виды сил межчастичного взаимодействия вы знаете? Нарисуйте типичный вид парной корреляционной функции молекул в воздухе. Выделите характерные области. Обоснуйте нарисованное.
4. Неравновесный метод вычисления вязкости в молекулярной динамике. Проблема вычисления вязкости для неньютоновских жидкостей.

Билет 2.

1. Вопрос по выбору, связанный с моделированием системы частиц и ускорением её работы на суперкомпьютере.
2. Подходы к расчету фазовых равновесий первого рода.
3. Нарисуйте типичный вид парной корреляционной функции молекул в жидкости. Выделите характерные области. Обоснуйте нарисованное.
4. Метод аналитической аппроксимации хвостов автокорреляционных функций в методе Грина-Кубо: мотивация и примеры применения

Билет 3.

1. Вопрос по выбору, связанный с моделированием системы частиц и ускорением её работы на суперкомпьютере.
2. Граничные условия. Их влияние на свойства системы.
3. Как будет меняться вид парной корреляционной функции с ростом температуры в случаях разных фаз? Обоснуйте.

4. Диффузия меченых атомов (tracer diffusion).

Билет 4.

1. Вопрос по выбору, связанный с моделированием системы частиц и ускорением её работы на суперкомпьютере.
2. Расходимость МД траекторий. Возникновение необратимости.
3. Нарисуйте характерный вид автокорреляционной функции скоростей молекул в воздухе и жидкости. Обоснуйте нарисованное. Поведение в нуле времени? Где средняя скорость молекул больше: в воздухе или в стакане воды? Почему?
4. Найти концентрацию свободных электронов в алюминии, считая, что на каждый атом приходится три свободных электрона. Почему электронную подсистему для металлов при комнатной температуре обычно называют электронным газом?

Билет 5.

1. Вопрос по выбору, связанный с моделированием системы частиц и ускорением её работы на суперкомпьютере.
2. Методы оптимизации расчёта для дальнедействующих потенциалов (Ewald, PM, PPPM и др.). Суммы Эвальда.
3. Нарисуйте типичный вид парной корреляционной функции молекул в разных фазах. Выделите характерные области.
4. Какие основные атомистические процессы происходят с конструкционными материалами при облучении?

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен проводится в устной форме по билетам. В каждом билете представлено три теоретических вопроса и одно практическое. При проведении экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.