

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики
А.С. Батурин**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Методы программирования в моделировании физических процессов
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	4
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 30 час.

лабораторные занятия: 30 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составил: М.А. Логунов

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 03.03.2023

Аннотация

Курс «Методы программирования в моделировании физических процессов» предусматривает ознакомление студентов с технологиями параллельного программирования для дальнейшего использования при решении ресурсоёмких вычислительных задач математической физики и компьютерного моделирования на многопроцессорных вычислительных системах.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- ознакомление студентов с технологиями параллельного программирования для дальнейшего использования при решении ресурсоёмких вычислительных задач математической физики и компьютерного моделирования на многопроцессорных вычислительных системах.

Задачи дисциплины

- ознакомление обучающихся с предметом, принципами, методами параллельного программирования;
- приобретение обучающимися практических умений и навыков, необходимых для работы с многопроцессорными вычислительными системами;
- формирование умений и навыков для применения полученных знаний для решения обучающимися 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
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.9 Знает перечень ведущих периодических научных изданий и способен выделять актуальные научные публикации в профессиональной области

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- основные понятия математического и компьютерного моделирования;
- основы параллелизации на OpenMP и PosixThreads;
- теоретические основы параллельных алгоритмов;
- стохастические свойства динамических систем.

уметь:

- программировать с использованием технологии MPI;
- применять методы молекулярной динамики;
- оптимизировать и распараллеливать расчет взаимодействия частиц;
- моделировать релаксационные процессы.

владеть:

- методами работы в операционной системе Unix;
- методами программирования для Bash.

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		4		3
2	Введение в операционную систему Unix		2	2	8
3	Компиляция и запуск		3	3	7
4	Основы параллелизации		2	2	5
5	Введение в основы параллельного программирования		2	2	7
6	Основы MPI		3	3	2
7	Параллельные алгоритмы		3	1	2
8	Параллельные методы умножения матрицы		2	4	2
9	Основы метода молекулярной динамики		3	3	2
10	Моделирование конкретных физических систем		2	4	2
11	Оптимизация и распараллеливание		2	4	2
12	Стохастические свойства динамических систем		2	2	3
Итого часов			30	30	45
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

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

Семестр: 7 (Осенний)

1. Введение

Основные понятия математического и компьютерного моделирования.

2. Введение в операционную систему Unix

Введение в операционную систему Unix. Программирование для Bash.

3. Компиляция и запуск

Компиляция и запуск программ. Вспомогательные программы.

4. Основы параллелизации

Основы параллелизации на OpenMP и PosixThreads.

5. Введение в основы параллельного программирования

Введение в основы параллельного программирования с использованием технологии MPI.

6. Основы MPI

Основы MPI. Двухточечные и коллективные обмены.

7. Параллельные алгоритмы

Теоретические основы параллельных алгоритмов.

8. Параллельные методы умножения матрицы

Параллельные методы умножения матрицы на вектор и на матрицу, решения систем линейных уравнений.

9. Основы метода молекулярной динамики

Основы метода молекулярной динамики. Применение в молекулярной физике.

10. Моделирование конкретных физических систем

Моделирование конкретных физических систем. Применение в молекулярной и химической физике.

11. Оптимизация и распараллеливание

Оптимизация и распараллеливание расчета взаимодействия частиц.

12. Стохастические свойства динамических систем

Стохастические свойства динамических систем, моделирование релаксационных процессов.

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

компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор), доступ к вычислительному кластеру.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

- 1) Гергель, В. П. Современные языки и технологии параллельного программирования. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 406 с.
- 2) Антонов, А. С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 339 с.
- 3) Лупин С.А., Посыпкин М.А. Технологии параллельного программирования. ФОРУМ, 2013. - 205 с.

Дополнительная литература

- 1) Гергель В. П., Фурсов В. А.. Лекции по параллельным вычислениям. С.: СГАУ, 2009. - 164 с.
- 2) Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. М.: БХВ-Санкт-Петербург, 2004.

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

- 1) Сайт Лаборатории параллельных информационных технологий НИВЦ МГУ: <http://parallel.ru>
- 2) <http://scitation.aip.org/>
- 3) <http://www.sciencemag.org/>
- 4) <http://www.elibrary.ru>

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

- 1) Unix-система на кластере с системой очередей PBS.
- 2) Компилятор gcc, его аналоги с библиотеками mpi, posix threads, openmp.
- 3) Пакет для анализа данных gnuplot.
- 4) Программные пакеты winscp, putty.

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

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общей методикой распараллеливания алгоритмов, а с другой стороны, должен научиться эффективно использовать различные программные инструменты для проведения вычислений на многопроцессорных вычислительных системах.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и методы дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий и выполнение задач, поставленных на занятии;
- 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 алгоритм задачи, теоретический анализ эффективности распараллеливания, программный код, сравнение результатов теоретического анализа с результатами, полученными при вычислениях, умение объяснить без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

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

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

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	<u>4</u>
квалификация:	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Экзамен	
Разработчик:	М.А. Логунов

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.9 Знает перечень ведущих периодических научных изданий и способен выделять актуальные научные публикации в профессиональной области

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы программирования в моделировании физических процессов» обучающийся должен:

знать:

- основные понятия математического и компьютерного моделирования;
- основы параллелизации на OpenMP и PosixThreads;
- теоретические основы параллельных алгоритмов;
- стохастические свойства динамических систем.

уметь:

- программировать с использованием технологии MPI;
- применять методы молекулярной динамики;
- оптимизировать и распараллеливать расчет взаимодействия частиц;
- моделировать релаксационные процессы.

владеть:

- методами работы в операционной системе Unix;
- методами программирования для Bash.

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

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

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

- 1) Распараллеленный код для моделирования системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса, гравитационному потенциалу, кулоновскому потенциалу.
- 2) Оценить эффективность и ускорение распараллеленной программы в зависимости от числа процессоров и масштаба задачи. Сравнить оценки с формулой Амдаля и с формулой, предложенной на основе расчёта числа арифметических операций и числа передач.
- 3) Представить визуализацию движения моделируемой системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса, гравитационному потенциалу, кулоновскому потенциалу.
- 4) Получить график парной корреляционной функции для системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса, гравитационному потенциалу, кулоновскому потенциалу при разных температурах.
- 5) Получить зависимость флуктуаций полной энергии системы в зависимости от шага по времени и порядка точности численной схемы.
- 6) Компиляция и запуск последовательных и MPI-программ с использованием систем очередей PBS. Сравнение особенностей работы функций по передаче информации между процессорами.
- 7) Стохастические свойства динамических систем
- 8) Параллельные алгоритмы
- 9) Моделирование конкретных физических систем
- 10) Основы параллелизации

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Распараллеленный код для моделирования системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса, гравитационному потенциалу, кулоновскому потенциалу.
2. Оценить эффективность и ускорение распараллеленной программы в зависимости от числа процессоров и масштаба задачи. Сравнить оценки с формулой Амдала и с формулой, предложенной на основе расчёта числа арифметических операций и числа передач.

Билет 2.

1. Получить зависимость флуктуаций полной энергии системы в зависимости от шага по времени и порядка точности численной схемы.
2. Компиляция и запуск последовательных и MPI-программ с использованием систем очередей PBS. Сравнение особенностей работы функций по передаче информации между процессорами.

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

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.