

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

УТВЕРЖДЕНО
решением ученого совета ННГУ
протокол от "30"ноября 2022 г. №13

Рабочая программа дисциплины
«Современные численные методы в физике наноструктур»

Уровень высшего образования
Подготовка научных и научно-педагогических кадров

Научные специальности

1.1.2. Дифференциальные уравнения и математическая физика, 1.1.4. Теория вероятностей и математическая статистика, 1.1.5. Математическая логика, алгебра, теория чисел и дискретная математика, 1.1.8. Механика деформируемого твердого тела, 1.2.1. Искусственный интеллект и машинное обучение, 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, 1.3.11. Физика полупроводников, 1.3.19. Лазерная физика, 1.3.4. Радиофизика, 1.3.7. Акустика, 1.3.8. Физика конденсированного состояния, 1.4.1. Неорганическая химия, 1.4.2. Аналитическая химия, 1.4.3. Органическая химия, 1.4.4. Физическая химия, 1.4.7. Высокомолекулярные соединения, 1.4.8. Химия элементоорганических соединений, 1.5.11. Микробиология, 1.5.15. Экология, 1.5.2. Биофизика, 1.5.21. Физиология и биохимия растений, 1.5.5. Физиология человека и животных, 2.2.2. Электронная компонентная база микро и наноэлектроники, квантовых устройств, 3.2.7. Аллергология и иммунология, 5.1.1. Теоретико-исторические правовые науки, 5.1.2. Публично-правовые (государственно-правовые) науки, 5.1.3. Частно-правовые (цивилистические) науки, 5.1.4. Уголовно-правовые науки, 5.1.5. Международно-правовые науки, 5.12.1. Междисциплинарные исследования когнитивных процессов, 5.2.3. Региональная и отраслевая экономика, 5.2.4. Финансы, 5.2.6. Менеджмент, 5.3.7. Возрастная психология, 5.4.2. Экономическая социология, 5.4.4. Социальная структура, социальные институты и процессы, 5.4.6. Социология культуры, 5.4.7. Социология управления, 5.5.2. Политические институты, процессы, технологии, 5.5.4. Международные отношения, глобальные и региональные исследования, 5.6.1. Отечественная история, 5.6.2. Всеобщая история, 5.6.7. История международных отношений и внешней политики, 5.7.1. Онтология и теория познания, 5.8.2. Теория и методика обучения и воспитания, 5.8.7. Методология и технология профессионального образования, 5.9.2. Литературы народов мира, 5.9.5. Русский язык. Языки народов России, 5.9.6. Языки народов зарубежных стран (с указанием конкретного языка или группы языков), 5.9.9. Медиакоммуникации и журналистика

Нижний Новгород
2023 год

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Современные численные методы в физике наноструктур» является факультативной дисциплиной по выбору и изучается на 3 году обучения в 5 семестре.

Целями освоения дисциплины являются:

- освоение следующих фундаментальных положений: основные идеи распараллеливания вычислений при моделировании физических задач, организация операционных систем, методы передачи данных, работа на распределенных вычислительных системах;
- изучение параллельных вычислений, процессов обработки данных на многопроцессорных комплексах, в которых одновременно могут выполняться несколько операций *компьютерной системой*.

3. Структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины (модуля) составляет всего - 36 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа – 18 часа, 18 часа – занятия семинарского типа).

Таблица 2

Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего (часы)	В том числе					Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего		
	Очное						
1. Параллельные вычисления.	16	4	4	–	8	8	
2. Алгоритмы решения физических задач с использованием суперкомпьютерных технологий.	19	5	5	–	10	9	
3. Стандарты OpenMP и MPI.	17	4	4	–	8	9	

4. Технология CUDA.	19	5	5		10	9
В т.ч. текущий контроль	2					
Промежуточная аттестация – зачет						

Таблица 3

Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Форма проведения занятий	Форма текущего контроля
1.	Параллельные вычисления.	<p>Основные идеи распараллеливания вычислений при моделировании физических задач, организация операционных систем, методы передачи данных, работа на распределенных вычислительных системах.</p> <p>Параллельными процессы обработки данных, в которых одновременно могут выполняться несколько операций <i>компьютерной системы</i>.</p> <p>Суперкомпьютер.</p> <p>Изучение вычислительных система, обладающих предельными характеристиками по производительности.</p> <p>Кластеры, мультипроцессоры и мультимпьютеры.</p> <p>Современная архитектура.</p>	Лекции, практические занятия.	Презентации обучающимися докладов по индивидуальным тематическим заданиям.

2.	Алгоритмы решения физических задач с использованием суперкомпьютерных технологий.	Задача рассеяния и динамика волновых пакетов в двумерной системе. Метод численного решения трехмерного уравнения Шредингера. Оценка ускорения. Практическая реализация на суперкомпьютере «Лобачевский».	Лекции, практические занятия.	Презентации обучающимися докладов по индивидуальным тематическим заданиям.
3.	Стандарты OpenMP и MPI.	Практикум на компьютере. Решение базовых задач. Передача данных. MPI. OpenMP. Структура суперкомпьютера «Лобачевский». Программирование тестовых физических задач с применением технологий OpenMP и MPI.	Лекции, практические занятия.	Презентации обучающимися докладов по индивидуальным тематическим заданиям.
4.	Технология CUDA.	Технологии программирования на графических процессорах. Ускорение вычислений с помощью технологии CUDA. Программирование тестовых физических задач с применением технологии CUDA.	Лекции, практические занятия.	Презентации обучающимися докладов по индивидуальным тематическим заданиям.

4. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся предполагает изучение конспектов лекций, выделенных разделов основной литературы, а также дополнительной литературы, подготовку устного доклада (публичного выступления), подготовку к промежуточной аттестации.

Перечень основной и дополнительной литературы для самостоятельного изучения приведен в п. 7 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Контрольные вопросы для промежуточной аттестации, примерные темы для устного доклада (публичного выступления) приведены в п. 6.4 настоящей Рабочей программы дисциплины.

5. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

5.1. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

При выполнении всех работ учитываются следующие **основные критерии**:

- уровень теоретических знаний (подразумевается не только формальное воспроизведение информации, но и понимание предмета, которое подтверждается правильными ответами на дополнительные, уточняющие вопросы, заданные экзаменаторами);
- умение использовать теоретические знания при анализе конкретных проблем, ситуаций;
- качество изложения материала, то есть обоснованность, четкость, логичность ответа, а также его полнота (то есть содержательность, не исключающая лаконичности);
- способность устанавливать внутри- и межпредметные связи,
- оригинальность мышления, знакомство с дополнительной литературой и другие факторы.

Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме экзамена

Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме зачета

Оценка	Уровень подготовленности, характеризуемый оценкой
<i>Зачтено</i>	владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить проблемные ситуации в организации научных исследований, способность критически анализировать и сравнивать существующие подходы и методы к оценке результативности научной деятельности, свободное владение источниками, умение четко и ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях.
<i>Не зачтено</i>	непонимание смысла ключевых проблем, недостаточное владение науковедческой терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации, неспособность анализировать и сравнивать существующие концепции, подходы и методы, неумение ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях.

5.2. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, используемых для оценивания результатов обучения по дисциплине

5.2.1. При проведении зачета обучающимся предлагаются следующие контрольные вопросы, охватывающие программу дисциплины

1. Основные идеи распараллеливания вычислений при моделировании физических задач.
2. Организация операционных систем.
3. Методы передачи данных.

4. Работа на распределенных вычислительных системах.
5. Стандарт OpenMP.
6. Стандарт MPI.
7. Структура кластера НИФТИ ННГУ.
8. Решение задачи рассеяния в квантовой механике. S-матрица.
9. Численное решение двумерного уравнения Шредингера.
10. Численное решение трехмерного уравнения Шредингера.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Гергель В.П., Баркалов К.А., Мееров И.Б., Сысоев А.В., Бастратов С.И. Параллельные вычисления. Технологии и численные методы: учеб. пособие : в 4 т. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ. – 2013.

Т. 1 – 239 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=455874> 2 экз

Т. 2 – 367 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=455875> 1 экз

Т. 3 – 415 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=455876> 2 экз

Т. 4 – 369 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=455877> 2 экз

2. Воеводин В.В. – Вычислительная математика и структура алгоритмов: 10 лекций о том, почему трудно решать задачи на вычисл. системах параллел. архитектуры и что надо знать дополнительно, чтобы успешно преодолевать эти трудности : учеб. для студентов. – М. – 2010. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=445262> 1 экз

3. Денисенко М.В., Сатанин А.М. – Применение гетерогенных вычислительных систем и технологии CUDA для моделирования физических процессов. – Электронное учебно-методическое пособие. – Н. Новгород: Нижегородский государственный университет, 2012. – 53 с. (Электронная свободно доступная версия: http://www.unn.ru/books/met_files/denisenko_satanin.doc).

б) дополнительная литература:

1. Гергель В.П. Высокопроизводительные вычисления дл многоядерных многопроцессорных систем. Учебное пособие – Нижний Новгород; Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2010. (Электронная свободно распространяемая версия: <http://www.unn.ru/pages/e-library/methodmaterial/2010/7.pdf>).

2. Мультипроцессорные системы и параллельные вычисления. – М.: Мир, 1976. – 383 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=261115> 2 экз

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

- 1) Пакеты компьютерных аналитических и графических вычислений для персонального компьютера Wolfram Mathematica и MathWorks MATLAB.
- 2) <http://www.lib.unn.ru/> – интернет-ресурсы Фундаментальной библиотеки ННГУ.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Помещения для проведения занятий: лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с

возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ.

- лицензионное программное обеспечение (Wolfram Mathematica и MathWorks MATLAB).

Автор

профессор кафедры теоретической физики
физического факультета,

д. ф.-м. н., профессор _____ / Сатанин А.М. /

Рецензент (ы)

Заведующий кафедрой д.ф.-м.н., доц. Бурдов В.А.

Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета от
_____ 2022 года, протокол № б/н