

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР ім. Б. І. ВЕРКІНА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.О. Директора
ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна
НАН України



М. І. Глушук

« 7 » 07. 2020 р.

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

Сучасні чисельні методи в теоретичній та експериментальній фізиці

конденсованого стану

(назва навчальної дисципліни)

з галузі знань «10 Природничі науки»
за спеціальністю «104 Фізика та астрономія»

РОЗРОБНИК/-И:

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, завідувач лабораторії відділу теоретичної фізики ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України Славін Віктор Валерійович



підпис

Погоджено Науковою радою з проблеми «Теоретична фізика конденсованого стану» ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України 02.06 2020 р., протокол № 206

Голова Ради  / О. С. Ковальов /

Вчений секретар Ради  / О. О. Ільїнська /

Затверджено Вченою радою Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України, 07.07. 2020 р., протокол № 5.

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР ім. Б.І. ВЕРКІНА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

СИЛАБУС

навчальної дисципліни

СУЧАСНІ ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ МЕТОДИ, ПІДХОДИ І СИСТЕМИ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ В НАУКОВИХ ЕКСПЕРИМЕНТАХ,
МОДЕЛЮВАННІ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ, РОЗРАХУНКАХ ТА ОБРОБЦІ ДАНИХ
2020-2021 навчальний рік

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
Назва	Сучасні обчислювальні методи, підходи і системи та їх застосування в наукових експериментах, моделюванні фізичних процесів, розрахунках та обробці даних
Адреса викладання	м. Харків, пр. Науки, 47
Рівень вищої освіти	Третій освітньо-науковий рівень
Галузі знань,	10 «Природничі науки»
Шифр та назва спеціальності	104 Фізика та астрономія
Викладач /-чі/	д.ф.-м.н., с.н.с. Славін В.В., пров. інженер Савін Ю.В.
Контактна інформація викладача (-ів)	slavin@ilt.khakov.ua
Графік занять	За розкладом
Консультації по курсу відбуваються	Середа 14.00-17.00. пр. Науки, 47, теор. корпус, к.607; он-лайн консультації через Skype або Viber (для узгодження часу писати на електронну пошту slavin@ilt.khakov.ua)
Сторінка курсу	https://

<i>Назва n/n</i>	<i>Коротка інформація</i>
Інформація про навчальну дисципліну	Дисципліна «Сучасні обчислювальні методи, підходи і системи та їх застосування в наукових експериментах, моделюванні фізичних процесів, розрахунках та обробці даних» є дисципліною за вибором зі спеціальності 104 – Фізика та астрономія для підготовки доктора філософії з природничих наук, яка викладається в 2 семестрах в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS)
Анотація	Курс «Сучасні обчислювальні методи, підходи і системи та їх застосування в наукових експериментах, моделюванні фізичних процесів, розрахунках та обробці даних» є курсом зі спеціалізації, який узагальнює та систематизує знання аспірантів, отримані у інших курсах, а також знайомить з новими методами чисельного моделювання фізичних процесів та чисельними методами обробки даних.
Мета та цілі	Метою вивчення дисципліни «Сучасні обчислювальні методи, підходи і системи та їх застосування в наукових експериментах, моделюванні фізичних процесів, розрахунках та обробці даних» є ознайомлення аспірантів з сучасним станом обчислювальних методів, з підходами і системами та їх застосуванням в наукових експериментах, моделюванням фізичних процесів, розрахунками та обробкою даних, надання інформації про пакети чисельної обробки експериментальних даних, пакети фізичного та математичного моделювання, а також формування уявлення про проблеми і перспективи розвитку обчислювальної техніки та її використання у теоретичній та експериментальній фізиці.
Загальний обсяг у кредитах Європейської кредитно-трансферної системи /ECTS/	4 кредити
Загальна кількість годин	120 годин
Структура	36 годин аудиторних: з них 30 годин лекцій, 6 годин семінарських занять, 84 години самостійної роботи.
Очікувані результати навчання	<p>У результаті вивчення курсу аспірант повинен</p> <p>знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - термінологію в галузі чисельного моделювання; - особливості використання сучасних пакетів чисельного моделювання фізичних процесів та обробки експериментальних даних; - основні положення теорії кінцево-різницевої систем, теорії лінійних операторів, та їх використання у чисельних методах;

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<ul style="list-style-type: none"> - фізичні основи роботи обчислювальних систем. <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - обґрунтовано вирішувати фізичні задачі в рамках своєї спеціальності, використовуючи різнобічні міждисциплінарні знання з математики і теоретичної фізики; - використовувати довідкову і навчальну літературу в галузі математики та теоретичної фізики, знаходити інші необхідні джерела інформації і працювати з ними. - пояснювати основні принципи та використовувати вивчені методи у самостійній науковій роботі.
Ключові слова	Кластерні та хмарні обчислення, чисельні методи, чисельне моделювання, чисельна обробка даних.
Програма навчальної дисципліни	<p>Тема 1. Обчислювальні комплекси обробки результатів фізичного експерименту.</p> <p>Тема 2. Програмне забезпечення для побудови обчислювальних комплексів обробки результатів фізичного експерименту.</p> <p>Тема 3. Стандарти та технології сучасного паралельного програмування.</p> <p>Тема 4. Методи чисельної обробки результатів фізичного експерименту.</p> <p>Тема 5. Чисельні методи рішення математичних рівнянь.</p> <p>Тема 6. Чисельні методи моделювання фізичних процесів.</p>
Короткий опис змісту тем	<p>Тема 1. Обчислювальні комплекси обробки результатів фізичного експерименту. Знайомство з базовими поняттями обчислювальної техніки. Кластерні та хмарні обчислення, принципи побудови та функціонування. Сучасний стан розвитку обчислювальної галузі в світі.</p> <p>Тема 2. Програмне забезпечення для побудови обчислювальних комплексів обробки результатів фізичного експерименту. Операційна система Linux. Організація та основні команди. Знайомство з менеджерами розподілених ресурсів для обчислювальних кластерів. Базові поняття та принципи функціонування. Програмне забезпечення, необхідне для взаємодії з користувачем. Створення пакетних файлів, необхідних для постановки завдань на кластер на прикладі менеджера розподілених ресурсів Torque (PBS).</p> <p>Тема 3. Стандарти та технології сучасного паралельного програмування.</p>

Назва п/п	Коротка інформація
	<p>Основні принципи побудови сучасних паралельних програм. Стандарт OpenMP. Організація та основні етапи реалізації програмного забезпечення з використанням OpenMP для мов програмування C/C++ та FORTRAN. Технологія MPI. Різновиди MPI. Організація та основні етапи реалізації програмного забезпечення із використанням OpenMPI для мов програмування C/C++. Сучасні вільні та комерційні пакети обробки результатів фізичного експерименту.</p> <p>Тема 4. Методи чисельної обробки результатів фізичного експерименту. Знайомство з такими базовими методами чисельної обробки експериментальних даних, як: метод найменших квадратів; поліноміальна апроксимація; чисельне інтегрування і диференціювання, чисельна інтерполяція; дискретне Фур'є перетворення і частотна фільтрація сигналу; аналого-цифрове (АЦП) та цифро-аналогове перетворення (ЦАП).</p> <p>Тема 5. Чисельні методи рішення математичних рівнянь. Чисельне рішення системи лінійних алгебраїчних рівнянь наступними методами: метод половинного ділення, метод хорд, метод дотичних (метод Ньютона), метод оберненої матриці, метод Крамера і метод Гауса. Чисельне рішення системи нелінійних рівнянь методом Ньютона. Чисельне рішення системи нелінійних диференціальних рівнянь методом Рунге – Кутти.</p> <p>Тема 6. Чисельні методи моделювання фізичних процесів. Основні методи чисельного моделювання класичної фізики: Класичні методи молекулярної динаміки. Класичні методи Монте-Карло (Monte Carlo – MC). Основні методи чисельного моделювання квантової фізики: метод точної діагоналізації (Exact Diagonalization – ED). Квантові методи Монте-Карло (Quantum Monte Carlo – QMC). Теорія функціоналу густини (Density Functional Theory – DFT). Метод ренормгрупи матриці густини (Density Matrix Renormalization Group – DMRG).</p>
Теми лекційних занять	<ul style="list-style-type: none"> - Кластерні та хмарні обчислення, принципи побудови та функціонування. - Сучасний стан розвитку обчислювальної галузі в світі. - Менеджери розподілених ресурсів для обчислювальних кластерів. Програмне забезпечення, необхідне для взаємодії з користувачем. - Операційна система Linux. Організація та основні команди. - Організація та основні етапи реалізації програмного забезпечення з використанням OpenMP для мов програмування C/C++ та FORTRAN. - Організація та основні етапи реалізації програмного забезпечення з використанням OpenMPI для мов програмування C/C++. - Сучасні вільні та комерційні пакети обробки результатів фізичного експерименту.

<i>Назва n/n</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<ul style="list-style-type: none"> - Метод найменших квадратів. Чисельна інтерполяція, інтегрування і диференціювання. - Дискретне Фур'є перетворення. Частотна фільтрація сигналу. Аналого-цифрове (АЦП) та цифро-аналогове перетворення (ЦАП); - Чисельне рішення системи лінійних алгебраїчних рівнянь. Метод половинного ділення, метод хорд, метод дотичних (метод Ньютона), метод оберненої матриці, метод Крамера і метод Гаусса. - Чисельне рішення системи нелінійних рівнянь методом Ньютона. Чисельне рішення системи нелінійних диференціальних рівнянь методом Рунге – Кутти. - Класичні методи молекулярної динаміки. Класичні методи Монте-Карло (Monte Carlo – MC). - Метод точної діагоналізації. Квантові методи Монте-Карло (Quantum Monte Carlo – QMC). - Теорія функціоналу густини. Метод ренормгрупи матриці густини.
Теми семінарських занять	<ul style="list-style-type: none"> - Створення пакетних файлів, необхідних для постановки завдань на кластер. - Директиви та бібліотеки стандарту OpenMP для язику програмування C++. - Вирішення системи лінійних алгебраїчних методом Гауса з застосуванням стандарту OpenMP
Теми для самостійної роботи	<ul style="list-style-type: none"> - Менеджер розподілених ресурсів для обчислювальних кластерів Torque. - Порівняння стандарту OpenMP з технологією OpenMPI. - Метод найменших квадратів та поліноміальна апроксимація - Чисельне інтегрування і диференціювання функції однієї змінної, чисельна інтерполяція. - Дискретне Фур'є перетворення. - Чисельне рішення системи лінійних алгебраїчних рівнянь. - Чисельне рішення системи нелінійних рівнянь. - Чисельне рішення системи, нелінійних диференціальних рівнянь. - Класичний метод Монте-Карло для одновимірної моделі Ізінга. - Метод точної діагоналізації для системи спинів $S=1/2$. - Квантовий метод Монте-Карло для одновимірної моделі Гейзенберга з $S=1/2$.
Підсумковий контроль, форма	Іспит
Пререквізити	Вивчення дисципліни передбачає володіння базовими знаннями у лінійній алгебрі, електриці і магнетизмі, класичній та квантовій механіки.
Постреквізити.	Основні положення навчальної дисципліни мають застосовуватися для підготовки, розробки та реалізації наукових та/або інноваційних проектів, які дають можливість отримувати нове цілісне знання та/або переосмислювати наявну інформацію для вирішення актуальних та пріоритетних проблем фундаментальної та прикладної науки в галузі фізики та математики при дотриманні норм академічної

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>																																
	етики і врахуванням соціальних, економічних, екологічних та правових аспектів власних наукових досліджень.																																
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	В процесі навчання використовуються лекції, презентації, методичні матеріали та спеціальна література. Форми навчання включають лекції, семінари та самостійну роботу. Організація процесу навчання аспірантів передбачає формування поняттєвого масиву інформації з кожної теми, контрольні питання та самостійну роботу з науковою літературою, а також розв'язання проблемних наукових задач та ситуацій.																																
Необхідне обладнання	Технічні засоби, необхідні для демонстрації презентацій, загально вживані програми і операційні системи.																																
Шкала оцінювання	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою:</p> <table border="1" data-bbox="600 560 1823 1098"> <thead> <tr> <th data-bbox="600 560 875 619" rowspan="2">СУМА БАЛІВ</th> <th data-bbox="875 560 1144 619" rowspan="2">ОЦІНКА ЄКТС</th> <th colspan="2" data-bbox="1144 560 1823 619">ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ</th> </tr> <tr> <th data-bbox="1144 619 1496 678">екзамен</th> <th data-bbox="1496 619 1823 678">залік</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="600 678 875 737">90-100</td> <td data-bbox="875 678 1144 737">A</td> <td data-bbox="1144 678 1496 737">відмінно</td> <td data-bbox="1496 678 1823 979" rowspan="4">зараховано</td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 737 875 796">82-89</td> <td data-bbox="875 737 1144 796">B</td> <td data-bbox="1144 737 1496 860">добре</td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 796 875 855">75-81</td> <td data-bbox="875 796 1144 855">C</td> <td data-bbox="1144 860 1496 979">задовільно</td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 855 875 914">64-74</td> <td data-bbox="875 855 1144 914">D</td> <td data-bbox="1144 979 1496 1038"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 914 875 973">60-63</td> <td data-bbox="875 914 1144 973">E</td> <td data-bbox="1144 1038 1496 1098"></td> <td data-bbox="1496 979 1823 1098" rowspan="3">не зараховано</td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 973 875 1032">35-59</td> <td data-bbox="875 973 1144 1032">FX</td> <td data-bbox="1144 1098 1496 1157"></td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 1032 875 1098">1-34</td> <td data-bbox="875 1032 1144 1098">F</td> <td data-bbox="1144 1157 1496 1216"></td> </tr> </tbody> </table>				СУМА БАЛІВ	ОЦІНКА ЄКТС	ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ		екзамен	залік	90-100	A	відмінно	зараховано	82-89	B	добре	75-81	C	задовільно	64-74	D		60-63	E		не зараховано	35-59	FX		1-34	F	
СУМА БАЛІВ	ОЦІНКА ЄКТС	ОЦІНКА ЗА НАЦІОНАЛЬНОЮ ШКАЛОЮ																															
		екзамен	залік																														
90-100	A	відмінно	зараховано																														
82-89	B	добре																															
75-81	C	задовільно																															
64-74	D																																
60-63	E		не зараховано																														
35-59	FX																																
1-34	F																																
Критерії оцінювання	<table border="1" data-bbox="600 1114 2076 1431"> <thead> <tr> <th data-bbox="600 1114 763 1182">Кількість балів</th> <th data-bbox="763 1114 2076 1182">Критерії оцінювання</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="600 1182 763 1326">90-100</td> <td data-bbox="763 1182 2076 1326">У відповіді повністю розкрито зміст питання. Матеріал викладено логічно, аргументовано, мова є грамотною, науковий стиль викладення матеріалу, вільне володіння термінологічним апаратом дисципліни. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що входить до навчальної програми, та продемонстровано високі практичні навички.</td> </tr> <tr> <td data-bbox="600 1326 763 1431">75-89</td> <td data-bbox="763 1326 2076 1431">Відповідь досить повно розкриває зміст питання або розкриває основні (найважливіші) аспекти у запитанні, слухач володіє термінологічним апаратом дисципліни. У викладеному матеріалі слухач має помилки із аргументацією відповіді, недостатня логічність та послідовність</td> </tr> </tbody> </table>				Кількість балів	Критерії оцінювання	90-100	У відповіді повністю розкрито зміст питання. Матеріал викладено логічно, аргументовано, мова є грамотною, науковий стиль викладення матеріалу, вільне володіння термінологічним апаратом дисципліни. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що входить до навчальної програми, та продемонстровано високі практичні навички.	75-89	Відповідь досить повно розкриває зміст питання або розкриває основні (найважливіші) аспекти у запитанні, слухач володіє термінологічним апаратом дисципліни. У викладеному матеріалі слухач має помилки із аргументацією відповіді, недостатня логічність та послідовність																							
Кількість балів	Критерії оцінювання																																
90-100	У відповіді повністю розкрито зміст питання. Матеріал викладено логічно, аргументовано, мова є грамотною, науковий стиль викладення матеріалу, вільне володіння термінологічним апаратом дисципліни. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що входить до навчальної програми, та продемонстровано високі практичні навички.																																
75-89	Відповідь досить повно розкриває зміст питання або розкриває основні (найважливіші) аспекти у запитанні, слухач володіє термінологічним апаратом дисципліни. У викладеному матеріалі слухач має помилки із аргументацією відповіді, недостатня логічність та послідовність																																

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>викладення матеріалу. У відповіді продемонстровано високий рівень володіння матеріалом, що було викладено на лекціях, та середній рівень володіння практичним матеріалом.</p> <p>60-74 Відповідь на контрольне питання є неповною, розкриває тільки деякі аспекти навчального матеріалу. Слухач припускається помилок у використанні термінології навчальної дисципліни. Рівень володіння матеріалом, що було викладено на лекціях, додатковим та практичним матеріалом є середнім.</p> <p>35-59 У відповіді допущено суттєві помилки, які свідчать про незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; слухач слабо володіє термінологією дисципліни.</p> <p>1-34 Відповідь практично відсутня, слухач демонструє незнання лекційного матеріалу або обов'язкової літератури; не володіє термінологією</p>
Питання до іспиту/заліку	<ol style="list-style-type: none"> 1. Кластери. Їх різновиди. Вимоги до обчислювальних кластерів. 2. Хмарні обчислення. Їх переваги та недоліки в порівнянні з кластерами. 3. Менеджер розподілених ресурсів для обчислювальних кластерів Torque. 4. Стандарт OpenMP. Призначення та реалізація. 5. Технологія OpenMPI. Призначення та реалізація. 6. Структура і використання апаратних і програмних інтерфейсів в приладах обробки та збору даних. 7. Чисельна обробка експериментальних даних. 8. Дискретне Фур'є перетворення. 9. Чисельні методи рішення систем лінійних алгебраїчних рівнянь. 10. Чисельні методи рішення систем нелінійних рівнянь. 11. Чисельні методи рішення систем нелінійних диференціальних рівнянь. 12. Методи молекулярної динаміки. 13. Класичні методи Монте-Карло. 14. Метод точної діагоналізації для квантовомеханічних систем. 15. Квантові методи Монте-Карло. 16. Теорія функціоналу густини. 17. Метод ренормгрупи матриці густини.
Література для вивчення дисципліни:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Корнєєв Ст. Д. Паралельне програмування MPI: Учеб. посібник / Яросл. держ. ун-т. Ярославль, 2002. 104 с. ISBN 5-8397-0239-0 2. Антонов А. С. Паралельне програмування з використанням технології OpenMP: Навчальний посібник. – М: Изд-во МДУ, 2009. – 77 с. ISBN 978-5-211-05702-9 3. Шпаковський Р. В., Верхотуров А. Е., Серікова Н. Ст. Керівництво по роботі на обчислювальному

<i>Назва п/п</i>	<i>Коротка інформація</i>
	<p>кластері. Навчальний посібник. Вузівська книга. 2004. - 172 с.</p> <p>4. Воеводін Вл.В., Жуматій С. А. "Обчислювальна справа і кластерні системи".-М.: Вид-во ДУ, 2007. - 150 с. ISBN 978-5-211-05440-0</p> <p>5. К. Биндер, Д. В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Пер. с англ. В. Н. Задкова. - М.: Наука. Физматлит, 1995. - 144 с.</p> <p>6. Д. В. Хеерман Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990. - 176 с.</p> <p>7. Рапапорт Д. К. Мистецтво молекулярної динаміки / Рапапорт Д. К. ; Дьяконова А. Н. (пер. з англ.); Єфремов Р. Р. (навч. ред.). — М. ; Іжевськ : Ін-т комп'ютер. дослідж., 2012. — 630 с. ISBN 978-5-4344-0083-1.</p> <p>8. F. F. Assaad. in Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC), edited by J. Grotendorst, D. Marx, and A. Muramatsu (NIC, Julich, 2002).</p> <p>9. Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC), edited by J. Grotendorst, D. Marx, and A. Muramatsu (NIC, Julich, 2002).</p> <p>10. J.K. Cullum and R.A. Willoughby. Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Society for Industrial and Applied Mathematics (2002).</p> <p>11. Anders W. Sandvik. Computational Studies of Quantum Spin Systems https://arxiv.org/abs/1101.3281v1</p>
Додаткова література:	<p>1. B.A. Berg. Multicanonical Simulations Step by Step arxiv.org/abs/cond-mat/0206333v2</p> <p>2. David M. Ceperley. An Overview of Quantum Monte Carlo Methods http://people.physics.illinois.edu/ceperley/papers/213.pdf</p> <p>3. Fabien Alet. A Quick introduction to Quantum Monte Carlo methods (ALPS Tutorial) - PSI http://http://alps.comp-phys.org/mediawiki/images/d/d8/QMC.PSI.pdf</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.