

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
«Ивановский государственный энергетический университет  
имени В.И.Ленина»

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета информатики  
и вычислительной техники

\_\_\_\_\_ Кокин В.М.

“ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 201\_\_

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«МОДЕЛИРОВАНИЕ БОЛЬШИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ  
МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ»**

Специальность 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ»

Квалификация (степень) выпускника кандидат технических наук

Форма обучения очная, заочная

(очная, заочная и др.)

Выпускающая кафедра Высокопроизводительных вычислительных систем

Кафедра-разработчик РПД Высокопроизводительных вычислительных систем

Курс	Трудоем- кость з.е./ час.	Лек- ций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат. работ, час.	Курсовое проектир ование, час	СРС, час	Форма промежуточного (рубежного) контроля (экзамен/зачет)
3	3 / 108	10				98	Зачет
Итого	3 / 108	10				98	

Рабочая программа дисциплины (РПД) составлена в соответствии с «Федеральными государственными требованиями к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура)», утвержденными приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 16 марта 2011 года № 1365 с учетом специфики научной специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Программу составил:  
кафедра Высокопроизводительных вычислительных систем  
д.ф.м.н., профессор Ясинский Ф.Н.

Рецензент(ы):

---

---

---

---

Программа одобрена на заседании кафедры Высокопроизводительных вычислительных систем:  
протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

Председатель цикловой методической комиссии по направлению:  
д.т.н. Ратманова И.Д.

## **СОДЕРЖАНИЕ**

1. Цели освоения дисциплины.
2. Структура и содержание дисциплины.
3. Формы контроля освоения дисциплины.
4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.
5. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

### **Приложения**

Приложение 1. Аннотация рабочей программы.

## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины является достижение следующих результатов обучения (РО):

- **знания:** математические модели сложных молекулярных систем. Основные дифференциальные уравнения, описывающие движение таких систем. Способы их интегрирования.
- **умения:** выбрать подходящую математическую модель для предложенного молекулярного объекта.
- **навыки:** составления компьютерных программ для решения дифференциальных уравнений, описывающих поведение заданной молекулярной системы.

## 2. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ модуля образовательной программы	№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы					Всего часов
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Курсовое проектирование	СРС	
	<b>1</b>	Дифференциальные уравнения, описывающие поведение молекулярных систем в классической и квантовой постановках	4				34	<b>38</b>
	<b>2</b>	Способы решения уравнений молекулярной динамики в классической постановке	4				34	<b>38</b>
	<b>3</b>	Способы решения уравнений молекулярной динамики в квантовой постановке	2				30	<b>32</b>
<b>ИТОГО:</b>			<b>10</b>				<b>98</b>	<b>108</b>

### 3.1. Лекции

№ п/п	Номер раздела дисциплины	Объем, часов	Тема лекции
1	1	2	Классические уравнения для молекулярной системы
2	1	2	Способы решения классических систем
3	2	2	Квантовые уравнения для молекулярной системы
4	2	2	Способы решения квантовых систем
5	3	2	Гибридные квантово-классические системы
Итого:		10	

### 3.2. Самостоятельная работа студента

Раздел дисциплины	№ п/п	Вид СРС	Трудоемкость, часов
Раздел 1	1	Выполнение индивидуального задания	34
Раздел 2	2	Выполнение индивидуального задания	34
Раздел 3	3	Выполнение индивидуального задания	30
Итого:			98

### 3.3. Примерные темы индивидуальных заданий

- 3.3.1. Молекулярный маятник. Сравнение различных способов интегрирования;
- 3.3.2. Линейная система молекул;
- 3.3.3. Явная и неявная схемы для классической модели;
- 3.3.4. Вопросы устойчивости при решении молекулярно-динамических задач;
- 3.3.5. Многошаговый метод для молекулярных задач;
- 3.3.6. Метод частиц в ячейке;
- 3.3.7. Методы частица-частица и частица-поле;
- 3.3.8. Моделирование действия излучения на вещество;
- 3.3.9. Уравнения Больцмана и способы его решения;
- 3.3.10. Разреженный газ и его моделирование.

## 3. ФОРМЫ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Текущий контроль** освоения дисциплины производится в соответствии с индивидуальным планом аспиранта.

**Промежуточный (Рубежный) контроль** по дисциплине проходит в форме зачета по окончании курса.

#### 4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

##### а) основная литература:

- Хокни, Иствуд. Численное моделирование методом частиц.
- Н.Н.Калиткин. Численные методы.
- В.В.Воеводин. Параллельные вычисления. – СПб, Петербург, 2002. – 608 с.
- В.В.Воеводин, Вл.В.Воеводин. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ – Петербург, 2002. – 608 с.
- Г.И.Шпаковский, Н.В.Серикова. Программирование для многопроцессорных систем в стандарте MPI. – Минск, БГУ, 2002. – 324 с.
- Ф.Н.Ясинский, Л.П.Чернышева. Многопроцессорные вычислительные системы. Из-во ИГЭУ, Иваново, 1998 г. – 108 с.
- Э.Ф.Балаев, Н.В.Нуждин, В.В.Пекунов, С.Г.Сидоров, Л.П.Чернышева, И.Ф.Ясинский, Ф.Н.Ясинский. Численные методы и параллельные вычисления для задач механики жидкости, газа и плазмы. Из-во ИГЭУ, Иваново, 2003 г. – 336 с.
- С.А.Ключков, Ф.Н.Ясинский. Численные методы молекулярной динамики и нанотехнологии. Из-во ИГЭУ, Иваново, 2007 г. – 84 с.
- В.В.Пекунов, С.Г.Сидоров, Л.П.Чернышева, А.В.Евсеев, Ф.Н.Ясинский. Алгоритмы и программы для многопроцессорных суперкомпьютеров. Из-во ИГЭУ, Иваново, 2007 г. – 132 с.
- Е.Ю.Филатов, Ф.Н.Ясинский. Математическое моделирование течений жидкостей и газов, Из-во ИГЭУ, Иваново, 2007 г. – 84 с.
- Ф.Н.Ясинский, Л.П.Чернышева, В.В.Пекунов. Математическое моделирование с помощью компьютерных сетей, Из-во ИГЭУ, Иваново, 2000 г. – 202 с.
- В.В.Пекунов, Ф.Н.Ясинский. Вычислительная математика. Интерполяция, интегралы, нелинейные уравнения и системы, Из-во ИГЭУ, Иваново, 2008 г. – 108 с.
- С.Г.Сидоров, Л.П.Чернышева, Б.Л.Ершов, Ф.Н.Ясинский. Нейрокомпьютеры. Устройство. Работа. Моделирование на ПК, Из-во ИГЭУ, Иваново, 2002 г. – 24 с.
- В.В.Пекунов, Ф.Н.Ясинский. Основы работы с многопроцессорной вычислительной системой МВС-100. Из-во ИГЭУ, Иваново, 2005 г. – 24 с.
- В.В.Пекунов, Ф.Н.Ясинский. Сборник задач по численным методам и распараллеливанию вычислений. Из-во ИГЭУ, Иваново, 2004 г. – 92 с.

##### б) дополнительная литература:

- Игер, Билл. Работа в Internet / Б. Игер ; пер. с англ. М. Б. Левина. под ред. А. Тихонова.—М.: Бином, 1996.—320 с.: ил.—ISBN 0-7897-0096-4.—ISBN 5-7503-0052-8.
- 200% самоучитель компьютера и интернета: учебное пособие / под ред. М. П. Левина.—М.: Технолоджи-3000, 2004.—480 с: ил.—ISBN 5-94472-018-2.
- Романенко, Владимир Николаевич. Сетевой информационный поиск: практ. пособие / В. Н. Романенко, Г. В. Никитина ; Рос. акад. естеств. наук. Сев.-зап. отд-ние образования и развития науки.—СПб.: Профессия, 2003.—288 с: ил.—(Специалист).—ISBN 5-93913-044-5.
- Филичев, Петр Владимирович. Компьютерные системы: курс лекций / П. В. Филичев, ; Мин-во образования Рос. Федерации, Иван. гос. энерг. ун-т.—Иваново: Б.и., 2002.—132с.—ISBN 5-89482-229-7.
- Мурин, Александр Вячеславович. Поиск информации в Интернете: методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Мировые

информационные ресурсы" / А. В. Мурин ; Федеральное агентство по образованию, ГОУВПО "Ивановский государственный энергетический университет им. В. И. Ленина", Каф. информационных технологий ; ред. Б. А. Баллод.—Иваново: Б.и., 2010.—24 с.

- Рассолов, Илья Михайлович. Интернет - право: учебное пособие для вузов / И. М. Рассолов ; Московский университет МВД России, Фонд содействия правоохранительным органам "Закон и право".—М.: ЮНИТИ-ДАНА: Закон и право, 2004.—143 с.—(Высшее профессиональное образование: Юриспруденция).—Библиогр.: с. 140-142.—ISBN 5-238-00796-5.
  - Преподавание в сети Интернет: учебное пособие / М-во образования Рос. Федерации, Некоммерческое партнерство "Открытый университет", Рос. гос. ин-т открытого образования; под ред. В. И. Солдаткина.—М.: Высшая школа, 2003.—792 с.—ISBN 5-06-004715-6.
  - Андреев, Александр Александрович. Введение в Интернет-образование: учебное пособие / А. А. Андреев.—М.: Логос, 2003.—76 с: ил+ 1 электрон. опт. диск (CD-ROM).—ISBN 5-94010-245-X.
  - Быстро и легко осваиваем работу в сети Интернет: [практическое пособие] / под ред. Ф. А. Резникова.—М.: Лучшие книги, 2000.—352 с: ил.—(Быстро и легко).—ISBN 5-93673-002-6.
  - Снелл, Нэд. Освой самостоятельно Internet за 24 часа: [учебное пособие: пер. с англ.].—3-е изд.—М.[и др.]: Вильямс, 1999.—381с: ил.—(Руководство для начинающих).—Доп. тит. л. на англ. яз.—ISBN 5-8459-0035-2.
  - Мировые информационные ресурсы. Интернет: [практикум для вузов / В. А. Королёв и др.] ; под общ. ред. П. В. Акинина.—М.: КНОРУС, 2008.—256 с: ил.—ISBN 978-5-85971-803-0.
  - Коцюбинский, А. О. Современный самоучитель работы в сети Интернет. Быстрый старт: [практическое пособие] / А. О. Коцюбинский, С. В. Грошев.—М.: Издательство Триумф, 1997.—456 с: ил.—ISBN 5-89392-004-X.
- с) программное обеспечение, Интернет-ресурсы, электронные библиотечные системы:
- <http://www.vvs.ispu.ru>
  - <http://www.mon.gov.ru>
  - <http://www.ed.gov.ru>
  - <http://obrnadzor.gov.ru>
  - <http://www.intuit.ru>
  - <http://www.edu.ru>
  - <http://catalog.iot.ru>
  - <http://ru.wikipedia.org>
  - <http://window.edu.ru>
  - <http://fcior.edu.ru>
  - <http://www.fipi.ru>
  - <http://www.msu.ru/resources>
  - <http://lib.mexmat.ru>
  - <http://www.phys.msu.ru/rus/library/resources-online>
  - <http://lib.qserty.ru/collections.cgi?type=tutorial>
  - <http://www.chem.msu.ru/rus/weldept.html#lib>
  - <http://www.ams.org/journals>
  - <http://www.oxfordjournals.org>
  - <http://www.sciencemag.org/magazine>
  - <http://www.worldscinet.com/subject.shtml>
  - <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

- <http://www.aspirantura.net>
- <http://www.aspirantura.spb.ru>
- <http://www.lib.csu.ru/polssilki/aspirant.shtml>
- <http://www.rsl.ru>
- <http://www.nlr.ru>
- <http://www.gpntb.ru>
- <http://www.spsl.nsc.ru>
- <http://www.teacode.com/online/udc>
- <http://software.intel.com/ru-ru/academic/?cid=sw:rus025academ>
- <http://school-collection.edu.ru>
- <http://w3.org>

## **5. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **1. Лекции:**

- а) комплект электронных презентаций/слайдов,
- б) аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

### **2. Прочее**

- а) рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет,
- б) рабочие места аспирантов, оснащенные компьютерами с доступом в Интернет, предназначенные для работы в электронной образовательной среде.

**АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ  
«МОДЕЛИРОВАНИЕ БОЛЬШИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ  
МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ»**

Дисциплина «Моделирование больших молекулярных систем с помощью многопроцессорной вычислительной техники» является дисциплиной по выбору аспиранта цикла образовательной составляющей подготовки аспирантов по научной специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Дисциплина реализуется на факультете Информатики и вычислительной техники кафедрой «Высокопроизводительные вычислительные системы».

Содержание дисциплины охватывает следующий круг вопросов.

Представление молекулярной системы в виде множества взаимодействующих частиц. Составление уравнений для движения этого множества частиц с учетом силы взаимодействия между ними. Выбор алгоритма интегрирования этих уравнений с учетом ограниченности вычислительных ресурсов.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа студента, консультации.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий контроль успеваемости в соответствии с индивидуальным планом аспиранта и промежуточный (рубежный) контроль в форме зачета.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.