

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования

«Ивановский государственный энергетический университет
имени В.И.Ленина»

УТВЕРЖДАЮ

Декан ИВТФ _____ В.М. Кокин

« ____ » _____ 2011г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ»

(БЗ.В.ДВ.2)

Направление подготовки 230100 «Информатика и вычислительная техника»

Квалификация (степень) выпускника бакалавры

(бакалавр, магистр)

Профиль подготовки «Высокопроизводительные вычислительные системы на базе больших ЭВМ»

Форма обучения очная

(очная, заочная и др.)

Выпускающая кафедра «Высокопроизводительные вычислительные системы»

Кафедра-разработчик РПД «Высокопроизводительные вычислительные системы»

Семестр	Трудоем- кость з.е./ час.	Лек- ций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат. работ, час.	Курсовое проекти- рование, час	СРС, час	Форма промежуточного (рубежного) контроля (экзамен/зачет)
7	6/216	8	22	24	24	102	Экзамен (36)
Итого	6/216	8	22	24	24	102	Экзамен (36)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций ПрООП ВПО по направлению 230100 – «Информатика и вычислительная техника, профилю подготовки «Высокопроизводительные вычислительные системы на базе больших ЭВМ».

Программу составили:
кафедра «Высокопроизводительные вычислительные системы»

Ясинский Ф.Н., д.ф-м.н., профессор кафедры Высокопроизводительные вычислительные системы _____

Рецензент:

Программа одобрена на заседании кафедры «Высокопроизводительные вычислительные системы» ИГЭУ

«25» января 2011 года, протокол № 8

Заведующий кафедрой _____ к.т.н., доцент С.Г. Сидоров

Программа одобрена на заседании цикловой методической комиссии ИВТФ

« » _____ 2011 года, протокол № .

Председатель ЦМК _____ И.Д. Ратманова

СОДЕРЖАНИЕ

1. Цели освоения дисциплины.
2. Место дисциплины в структуре ООП ВПО.
3. Структура и содержание дисциплины.
4. Формы контроля освоения дисциплины.
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.
6. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

Приложения

- Приложение 1. Аннотация рабочей программы.
Приложение 2. Технологии и формы преподавания.
Приложение 3. Технологии и формы обучения.
Приложение 4. Оценочные средства и методики их применения.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

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

- знания:
 - основных возможностей многопроцессорных вычислительных систем MPI, OpenMP, CUDA;
 - основных объектов математического моделирования, их распараллеливания с использованием указанных систем.
- умения:
 - работать с прикладными компьютерными программами при решении профессиональных задач;
 - производить вычисления и решать задачи в системах MPI, OpenMP, CUDA в следующих областях: численные и символьные вычисления, матричное исчисление, решение алгебраических уравнений и их систем, построение двумерных и трехмерных графиков, поиск экстремумов функций, интерполяция и аппроксимация, математическая статистика, решение обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.

Перечисленные РО являются основой для формирования следующих компетенций:

общекультурных:

- ОК-10 использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;
- ОК-11 способность и готовность владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, использовать компьютер как средство работы с информацией;
- ОК-12 иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией.

профессиональных:

ПК-2 осваивать методики использования программных средств для решения практических задач;

ПК-3 разрабатывать интерфейсы "человек - электронно-вычислительная машина";

ПК-4 разрабатывать модели компонентов информационных систем, включая модели баз данных;

ПК-5 проектно-технологическая деятельность: разрабатывать компоненты программных комплексов и баз данных, использовать современные инструментальные средства и технологии программирования.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВПО

Дисциплина «Моделирование сложных систем» относится к дисциплинам по выбору вариативной части профессионального цикла дисциплин.

Необходимыми условиями для освоения дисциплины являются: знание основ информатики, умение работы на компьютере с прикладными программами, умение программировать на алгоритмических языках программирования, знание теории и умение решать задачи элементарной и высшей математики.

В таблице приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций, заявленных в разделе «Цели освоения дисциплины»:

№ п/п	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины (группы дисциплин)
<i>Общекультурные компетенции</i>			
	ОК-10, ОК-11, ОК-12	Математический анализ, Линейная алгебра и аналитическая геометрия, Физика, Дискретная математика, Математическая логика и теория алгоритмов, Теория вычислительных процессов на МВС, Теория вероятностей и математическая статистика, Методы вычислений, Сложность вычислений, Специальные главы высшей математики, Уравнения математической физики, Иностраный язык, Информатика, Базы данных, Программирование, Введение в специальность, Архитектура вычислительных систем, Архитектура многопроцессорных вычислительных систем, Операционные системы, Сети и телекоммуникации, Компьютерная графика, Параллельное программирование, Технологии параллельного программирования, Компьютерные технологии, Интернет технологии, Теория параллельного программирования, Программное обеспечение МВС	Системы искусственного интеллекта, Нейрокомпьютерные системы, Защита информации, Моделирование технических систем на МВС, Моделирование энергетических систем на МВС, Многопоточное и распределенное программирование, GRID вычисления и облачные вычисления, Итоговая государственная аттестация

Профессиональные компетенции		
ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5	Информатика, Электротехника, электроника и системотехника, ЭВМ и периферийные устройства, Сети и телекоммуникации, Инженерная графика, Метрология, стандартизация и сертификация, Архитектура вычислительных систем, Архитектура многопроцессорных вычислительных систем, Администрирование кластерных систем, Производственная практика, Физика, Теория вероятностей и математическая статистика, Методы вычислений, Сложность вычислений, Специальные главы высшей математики, Уравнения математической физики, Операционные системы, Защита информации, Базы данных, Компьютерная графика, Программирование, Параллельное программирование, Технологии параллельного программирования, Компьютерные технологии, Интернет технологии, Теория параллельного программирования, Программное обеспечение МВС, Математический анализ, Теория вычислительных процессов на МВС.	Системы искусственного интеллекта, Нейрокомпьютерные системы, Моделирование технических систем на МВС, Моделирование энергетических систем на МВС, Многопоточное и распределенное программирование, GRID вычисления и облачные вычисления, Итоговая государственная аттестация

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

№ модуля образовательной программы	№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Виды учебной нагрузки и их трудоемкость, часы					
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Курсовое проектирование	СРС	Всего часов
1	1	Моделирование сложных систем	8	22	24	24	102	180
ИТОГО (без учета экзамена):			8	22	24	24	102	180

3.1. Лекции

№ п/п	Номер раздела дисциплины	Объем, часов	Тема лекции
1	1	2	Основы молекулярной динамики
2	1	2	Динамика молекулярных систем с упругими связями
3	1	2	Метод частиц в ячейках
4	1	2	Моделирование конденсации и кристаллизации
Итого:		8	

3.2. Лабораторные работы

№ п/п	Номер раздела дисциплины	Наименование лабораторной работы	Наименование лаборатории	Трудо-емкость, часов
1	1	Основы молекулярной динамики	Компьютерный класс	6
2	1	Динамика молекулярных систем с упругими связями	Компьютерный класс	6
3	1	Метод частиц в ячейках	Компьютерный класс	6
4	1	Моделирование конденсации и кристаллизации	Компьютерный класс	6
Итого:				24

3.3. Практические занятия (семинары)

№ п/п	Номер раздела дисциплины	Объем, часов	Тема практического занятия
1	1	8	Основы молекулярной динамики
2	1	8	Динамика молекулярных систем с упругими связями
3	1	4	Метод частиц в ячейках
4	1	2	Моделирование конденсации и кристаллизации
Итого:		22	

3.4. Курсовые работы

Курсовая работа по дисциплине выполняется по тематике входящей в тематику профиля подготовки бакалавров по направлению 230100.62 и включает разработку приложения с использованием технологий распараллеливания MPI, OpenMP, CUDA и объектно-ориентированного программирования. Темы курсовой работы выбираются по согласованию с преподавателем по следующим направлениям исследований:

- 1) Динамика молекулярных систем с упругими связями
- 2) Метод частиц в ячейках
- 3) Моделирование конденсации и кристаллизации

Выполнение курсовой работы планируется в компьютерном классе под руководством преподавателя, а также самостоятельно (дома либо в компьютерном классе).

Общая трудоемкость выполнения курсовой работы – 24 часа.

3.5. Самостоятельная работа студента

Раздел дисциплины	№ п/п	Вид СРС	Трудоемкость, часов
Раздел 1	1	Основы молекулярной динамики.	25
	2	Динамика молекулярных систем с упругими связями.	25
	3	Метод частиц в ячейках.	25
	4	Моделирование конденсации и кристаллизации.	27
Итого:			102

4. ФОРМЫ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Контроль освоения дисциплины производится в соответствии с ПОЛОЖЕНИЕМ о системе РИТМ в ИГЭУ.

Текущий контроль студентов производится в дискретные временные интервалы (в соответствии с приказом ректора о проведении ТК и ПК по системе РИТМ в ИГЭУ) лектором и преподавателями, ведущими лабораторные работы и практические занятия по дисциплине в следующих формах:

- выполнение и защита лабораторных работ;
- контрольные работы;
- посещаемость и активность на занятиях;
- выполнение и защита курсовой работы.

Промежуточный (Рубежный) контроль студентов производится по завершении изучения дисциплины, проходит в форме экзамена (включает в себя ответы на теоретические вопросы либо в форме компьютерного тестирования).

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Алгоритмы и программы для многопроцессорных суперкомпьютеров: учебное пособие / В. В. Пекунов [и др.] ; Федеральное агентство по образованию, ГОУВПО "Ивановский государственный энергетический университет им. В. И. Ленина", ГОУВПО "Ивановская государственная текстильная академия", Научно-исследовательский институт математического моделирования ИГТА.—Иваново: Б.и., 2007.—132 с.—ISBN 978-5-89482-315-3.
2. Численные методы и параллельные вычисления для задач механики жидкости, газа и плазмы: учебное пособие / Э. Ф. Балаев [и др.] ; Иван. гос. энерг. ун-т, Иван. гос. текстильная акад. [и др.].—Иваново: Б.и., 2003.—336 с.—ISBN 5-89482-871-8.
3. **Ясинский, Федор Николаевич.** Математическое моделирование с помощью компьютерных сетей: учебное пособие / Ф. Н. Ясинский, Л. П. Чернышева, В. В. Пекунов ; М-во образования Рос. Федерации, Иван. гос. энерг. ун-т.—Иваново: Б.и., 2000.—202 с.: ил.—ISBN 5-89482-147-9.
4. **Пантелеев, Андрей Владимирович.** Методы оптимизации в примерах и задачах: [учебное пособие для втузов] / А. В. Пантелеев, Т. А. Летова.—Изд. 3-е, стер.—М.: Высшая школа, 2008.—544 с: ил.—(Прикладная математика для ВТУЗов).—ISBN 978-5-06-004137-8.

б) дополнительная литература:

1. **Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.** Параллельные вычисления. -СПб.: БХВ- Петербург, 2002.-608с.
2. **Эндрюс Г.Р.** Основы многопоточного, параллельного и распределенного программирования.: Пер.с англ.-М.: Издательский дом «Вильямс», 2003.-512с.
3. **Корнеев В.В.** Параллельные вычислительные системы.- М.: «Нолидж»,1999.-320с.
4. **Богачёв К.Ю.** Основы параллельного программирования. - М. :БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003.-342с.
5. **Эхтер Ш., Робертс Дж.** Многоядерное программирование. –СПб.:Питер,2010.-316с.
6. **Боресков А.В., Харламов А.А.** Основы работы с технологией CUDA.- М.:ДМК Пресс, 2011,-232с.
7. **Санدرس Дж., Кэндрот Э.** Технологии CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров: Пер. с англ. - М.:ДМК Пресс, 2011.-232с.
8. **Миллер Р., Боксер Л.** Последовательные и параллельные алгоритмы: Общий подход. Пер. с англ.- М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 406 с.: ил.
9. **Рост, Рэнди.** OpenGL. Трехмерная графика и язык программирования шейдеров / Р. Дж. Рост ; пер. с англ. О. Вахромовой.—М. [и др.]: Питер, 2010.—432 с.—(Для профессионалов).—Доп. тит. л. на англ. яз.—ISBN 5-469-00383-3
10. **Хьюз, Камерон, Хьюз, Трейси.** Параллельное и распределенное программирование на C++.: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2004. – 672 с.: ил.
11. **Брайант, Рэндал Э.** Компьютерные системы: архитектура и программирование. Взгляд программиста: [пер. с англ.] / Р. Э. Брайант, Д. О'Халларон.—СПб.: БХВ-Петербург, 2005.—1104 с: схемы.—Парал. тит. англ.—ISBN 5-94157-433-9.
12. **Рыбников К.К.** Введение в дискретную математику и теорию решения экстремальных задач на конечных множествах. - М.: Гелиос АРВ, 2010. - 320 с.
13. **Джонс М. Т.** Программирование искусственного интеллекта в приложениях/ М. Тим Джонс; Пер. с англ. Осипов А.И. – М.: ДМК Пресс, 2006. – 312 с.: ил.
14. **Кьюу, Джим.** Объектно-ориентированное программирование / Дж. Кьюу, М. Джеанини. – СПб.: Питер, 2005. – 238 с: ил. – (Серия "Учебный курс"). – Парал. тит. англ. – ISBN 5-469-00462-7
15. **Пышкин, Евгений Валерьевич.** Основные концепции и механизмы объектно-ориентированного программирования: [учебное пособие для вузов] / Е. В. Пышкин.— СПб.: БХВ-Петербург, 2005.—640 с: ил+ 1 электрон. опт. диск (CD-ROM).—(Теория и технология программирования).—ISBN 5-94157-554-8

в) программное обеспечение, Интернет-ресурсы, электронные библиотечные системы:

1. операционная система Windows
2. Visual Studio 2008
3. Delphi 7
4. MathCAD 14
5. [www://parallel.ru](http://www.parallel.ru)
6. [www://intuit.ru](http://www.intuit.ru)
7. поисковые системы: Google, Yandex
8. электронная библиотека на сайте ИГЭУ: <http://library.ispu.ru>
9. мультимедиа материалы на сайте кафедры ВВС: <http://vvs.ispu.ru>.
10. ЭБС издательства «ЮРАЙТ» по адресу: www.biblio-online.ru.
11. Онлайн доступ к российским и зарубежным научным информационным ресурсам в тестовом режиме консорциума НЭИКОН по адресу: www.neicon.ru
12. Научная электронная библиотека по адресу: www.elibrary.ru.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Лекции:
 - a) комплект электронных презентаций / слайдов,
 - b) аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук).
2. Лабораторные работы:
 - a) компьютерный класс;
 - b) пакеты ПО общего назначения: программы-оболочки, текстовые редакторы;
 - c) университетский кластер;
 - d) специализированное ПО: MPI, OpenMP, CUDA.
 - e) системы программирования: Visual Studio, Delphi
3. Практические занятия:
 - a) комплект электронных презентаций / слайдов,
 - b) аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук).
4. Самостоятельная работа
 - a) компьютерная лаборатория, оснащенная современной компьютерной техникой с выходом в глобальную сеть Internet, соединенную с локальной сетью ИГЭУ;
 - b) пакеты ПО общего назначения;
 - c) специализированное ПО;
 - d) методические материалы поддержки дисциплины на сайте кафедры ВВС (<http://vvs.ispu.ru>).

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ «Моделирование сложных систем»

Дисциплина «Моделирование сложных систем» является дисциплиной по выбору вариативной части профессионального цикла дисциплин для подготовки студентов по направлению подготовки 230100.62 «Информатика и вычислительная техника».

Дисциплина реализуется на факультете Информатики и вычислительной техники кафедрой Высокопроизводительные вычислительные системы.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций:

- ОК-10 - использование основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применение методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;
- ОК-11 - способность и готовность владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, использовать компьютер как средство работы с информацией;
- ОК-12 - иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией. и профессиональных компетенций выпускника:
- ПК-2 - осваивать методики использования программных средств для решения практических задач;
- ПК-3 - разрабатывать интерфейсы "человек - электронно-вычислительная машина";
- ПК-4 - разрабатывать модели компонентов информационных систем, включая модели баз данных;
- ПК-5 - проектно-технологическая деятельность: разрабатывать компоненты программных комплексов и баз данных, использовать современные инструментальные средства и технологии программирования.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с моделированием сложных систем. В частности рассматриваются темы основ молекулярной динамики, динамики молекулярных систем с упругими связями, метод частиц в ячейках, моделирование конденсации и кристаллизации.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные работы, практические занятия, самостоятельную работу студента, выполнение курсовой работы.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий контроль успеваемости в формах защиты лабораторных работ, выполнения контрольных работ, выполнения курсовой работы и промежуточный (рубежный) контроль в форме экзамена.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

Программой дисциплины предусмотрены лекционные (8 часов), практические занятия (22 часа), лабораторные занятия (24 часа), курсовое проектирование (24 часа), самостоятельная работа студента (102 часа).

ТЕХНОЛОГИИ И ФОРМЫ ПРЕПОДАВАНИЯ

Рекомендации по организации и технологиям обучения для преподавателя

I. Образовательные технологии

Преподавание дисциплины ведется с применением следующих видов образовательных технологий:

Информационные технологии: использование электронных образовательных ресурсов при подготовке к лекциям и практическим занятиям, а также при выполнении лабораторных работ.

Интерактивные формы проведения занятий: использование мультимедийных обучающих материалов, а также средств оценки знаний и формирование индивидуальной образовательной траектории.

Работа в команде: совместная работа студентов в группе на практических занятиях.

Проблемное обучение: стимулирование студентов к самостоятельному приобретению знаний, необходимых для решения конкретной проблемы.

Контекстное обучение: мотивация студентов к усвоению знаний путем выявления связей между конкретным знанием и его применением.

II. Виды и содержание учебных занятий

Раздел 1

Теоретические занятия (лекции) – 8 часов

Лекция 1. Основы молекулярной динамики – 2 часа

Рассматриваются основы молекулярной динамики для системы частиц без связей. Вводится понятие близости на множестве частиц и два способа расчёта близости (по Эйлеру и по Лагранжу). Приведены различные потенциалы взаимодействия частиц.

Лекция 2. Динамика молекулярных систем с упругими связями – 2 часа

Рассматриваются множества частиц, для которых, кроме потенциальных сил, имеются ещё упругие связи между частицами. Эти связи могут обрываться. Излагаются методы интегрирования таких систем дифференциальных уравнений. Моделируются удар и взрыв в таких системах.

Лекция 3. Метод частиц в ячейках – 2 часа

Рассматривается метод частиц в ячейках. Приводятся следующие примеры: взрыв в пустоте, столкновение двух тел, истечение газа из сосуда.

Лекция 4. Моделирование конденсации и кристаллизации – 2 часа

Рассматриваются вопросы моделирования конденсации и кристаллизации.

Лабораторные работы – 24 часов, 4 работы по 6 часов.

Занятие 1. Основы молекулярной динамики – 6 часов

Форма проведения занятия – в подгруппах по 10-12 человек. Выполняются индивидуальные задания в соответствии с вариантом. Цель работы: освоение учащимися основ молекулярной динамики. Рассматривается молекулярный маятник, цепочка молекул.

Используемое оборудование: университетский кластер, компьютеры, оснащенные графическими платами.

Занятие 2. Динамика молекулярных систем с упругими связями – 6 часов

Форма проведения занятия – в подгруппах по 10-12 человек. Выполняются индивидуальные задания в соответствии с вариантом. Цель работы: исследовать разрушение тел при ударе. Используемое оборудование: университетский кластер, компьютеры, оснащенные графическими платами.

Занятие 3. Метод частиц в ячейках – 6 часов

Форма проведения занятия – в подгруппах по 10-12 человек. Выполняются индивидуальные задания в соответствии с вариантом. Цель работы: освоить метод частиц в ячейках и рассмотреть его на задачах о разлёте облака в пустоту и на задаче о соударении тел. Используемое оборудование: университетский кластер, компьютеры, оснащенные графическими платами.

Занятие 4. Моделирование конденсации и кристаллизации – 6 часов

Форма проведения занятия – в подгруппах по 10-12 человек. Выполняются индивидуальные задания в соответствии с вариантом. Цель работы: путём экспериментов с программой о движении свободных частиц, рассмотреть процессы конденсации и кристаллизации водорода. Используемое оборудование: университетский кластер, компьютеры, оснащенные графическими платами.

Практические занятия – 22 часа

Занятие 1. Основы молекулярной динамики – 8 часов

Форма проведения занятия – работа в команде. Разбираются вопросы: основы молекулярной динамики, определение близости на множестве частиц, методы интегрирования такой системы. Заслушиваются доклады студентов по вопросам, изучаемым самостоятельно.

Занятие 2. Динамика молекулярных систем с упругими связями – 8 часов

Форма проведения занятия – работа в команде. Разбираются вопросы: динамика молекулярных систем с упругими связями, разрыв этих связей, методы интегрирования при наличии упругих связей. Проводится контроль усвоения материала путем решения индивидуальных задач по моделированию процессов в сплошных средах.

Занятие 3. Метод частиц в ячейках – 4 часа

Форма проведения занятия – работа в команде. Разбираются тексты компьютерных программ, реализующих задачи моделирования взаимодействия типа частица-поле. Обсуждаются вопросы адаптации разбираемых программ для выполнения курсовой работы.

Занятие 4. Моделирование конденсации и кристаллизации – 2 часа

Форма проведения занятия – работа в команде. Разбираются тексты компьютерных программ, реализующих задачи моделирования конденсации и кристаллизации. Обсуждаются вопросы адаптации разбираемых программ для выполнения курсовой работы.

Курсовая работа – 24 часа

Трудоемкость выполнения работы – 24 часа (аудиторных). Самостоятельное выполнение курсовой работы – 30 час. Общая трудоемкость выполнения курсовой работы 54 часа.

При выполнении студентами курсовой работы решаются следующие вопросы: определение параметров поставленной задачи, построение математической модели, обзор современных методов решения задачи, обзор методов распараллеливания, выбор метода решения поставленной задачи, выбор метода распараллеливания, разработка однопроцессорного и многопроцессорного вариантов программы, выполнение расчетов/моделирования в соответствии с темой решаемой задачи.

Примерный перечень тем курсовых работ:

- 1) Математическое моделирование движения молекулярного маятника с помощью явных разностных схем.
- 2) Математическое моделирование движения молекулярного маятника с помощью неявных разностных схем.
- 3) Математическое моделирование движения цепочки атомов.
- 4) Динамика молекулярных систем с упругими связями и потенциальными силами.
- 5) Моделирование поведения атомов в нанотрубках.
- 6) Моделирование поведения атомов в фуллеренах.
- 7) Моделирование конденсации и кристаллизации в системах атомов с потенциальными силами.
- 8) Моделирование конденсации и кристаллизации в системах атомов с потенциальными силами и упругими связями.
- 9) Столкновение двух тел с упругими разрушаемыми силами.

Пример задания на курсовую работу:

Разработать приложения с использованием объектно-ориентированного подхода, в однопроцессорном и многопроцессорном вариантах, с использованием технологий MPI, OpenMP или CUDA для моделирования процессов конденсации и кристаллизации в замкнутом пространстве.

Управление самостоятельной работой студента – 102 часа

Реализуемые формы управления самостоятельной работой студента: консультации в ходе выполнения лабораторных работ, проверка отчетов по лабораторным работам, проверка домашних заданий и контрольных работ, консультации по выполнению курсовой работы. Подготовка к экзаменам.

ТЕХНОЛОГИИ И ФОРМЫ ОБУЧЕНИЯ

Рекомендации по освоению дисциплины для студента

Трудоемкость освоения дисциплины составляет 216 часов, из них 78 часов аудиторных занятий и 102 часа, отведенных на самостоятельную работу (без учета времени на подготовку экзамена) студента.

Рекомендации по распределению учебного времени по видам самостоятельной работы и разделам дисциплины приведены в таблице.

Контроль освоения дисциплины осуществляется в соответствии с ПОЛОЖЕНИЕМ о системе РИТМ в ИГЭУ.

Вид работы	Содержание (перечень вопросов)	Трудоемкость, час.	Рекомендации
Раздел №1			
Подготовка к лекциям	Основы молекулярной динамики, Метод частиц в ячейках	20	См. соотв. главы в литературе [1]- [4] доп. литературе [1]-[15], эл. библиотечной системе ИГЭУ [8],[10], [11], [12] сети Интернет [5], [6], [7], [9]
Подготовка к лабораторным работам	Изучение теоретического материала по MPI, OpenMP и CUDA.	20	См. конспект лекций и описание лабораторной работы
Оформление отчетов по лабораторным работам	Формирование теоретической части (математической модели), распечатка разработанной компьютерной программы, блок-схема алгоритма, анализ полученных результатов, ответы на контрольные вопросы	12	См. описание лабораторной работы
Подготовка к практическим занятиям	Изучение теоретического материала	20	См. конспект лекций, соотв. главы в литературе [1]- [4] доп. литературе [1]-[15], эл. библиотечной системе ИГЭУ [8],[10], [11], [12] сети Интернет [5], [6], [7], [9]
Выполнение курсовой работы	Постановка задачи, разработка математической модели, выбор системы распараллеливания, разработка алгоритма решения задачи, разработка параллельного алгоритма решения задачи, разработка приложения, тестирование приложения и его отладка, анализ результатов и контроль достоверности, подготовка отчета по курсовой работе	30	См. конспект лекций, соотв. главы в литературе [1]- [4] доп. литературе [1]-[15], эл. библиотечной системе ИГЭУ [8],[10], [11], [12] сети Интернет [5], [6], [7], [9]
Итого по разделу		102	

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА И МЕТОДИКИ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

Оценивание уровня учебных достижений студента осуществляется в виде текущего и промежуточного (рубежного) контроля в соответствии с ПОЛОЖЕНИЕМ о системе РИТМ в ИГЭУ.

Фонды оценочных средств

Фонды оценочных средств, позволяющие оценить РО по данной дисциплине, включают в себя:

- комплект заданий к лабораторным работам;
- шаблоны отчетов по лабораторным работам;
- комплекты контрольных и тестовых заданий для применения на ПК1, ПК2;
- варианты заданий к курсовой работе;
- примерный перечень вопросов для рубежного (итогового) контроля.

Критерии оценивания

Текущее электронное тестирование

Критерии пересчета результатов теста в баллы:

- рейтинг теста меньше 50% – 0 баллов,
- рейтинг теста 50% – min балл,
- рейтинг теста 100% – max балл,
- рейтинг теста от 50-100% – пересчет по формуле:
$$([\text{рейтинг теста}] - 50) / 50 * ([\text{max балл}] - [\text{min балл}]) + [\text{min балл}]$$

Лабораторные работы

Допуск к ЛР:

Допуск к выполнению ЛР происходит при условии наличия у студента печатной версии титульного листа отчета по лабораторной работе.

Отчет по ЛР:

Отчет по лабораторной работе представляется в печатном виде в формате, предусмотренном шаблоном отчета по лабораторной работе. Защита отчета проходит в форме доклада студента по выполненной работе и ответов на вопросы преподавателя.

В случае если оформление отчета и поведение студента во время защиты соответствуют указанным требованиям, студент получает максимальное количество баллов.

Основаниями для снижения количества баллов являются:

- небрежное выполнение,
- низкое качество графического материала,
- плохое знание теоретического материала.

Отчет не может быть принят и подлежит доработке в случае:

- отсутствия необходимых разделов,
- отсутствия необходимого графического материала,
- критических ошибок в ходе выполнения работы и неверного результата.

Подготовка и защита курсовой работы

Объем работы – не менее 10 стр. Обязательно использование не менее 3 источников, опубликованных в последние 10 лет. Обязательно использование в курсовой работе методов параллельного программирования.

Процедура защиты работы: демонстрация разработанного приложения с последующим групповым обсуждением, ответы на вопросы преподавателя.

Критерии оценивания:

Приводятся критерии для оценивания работы с указанием количества баллов;

- соответствие содержания заявленной теме 1 балл;
- корректность выполнения практической части 2 балла;
- использование методов параллельного программирования 1 балл;
- правильность оформления отчета 1 балл.

Экзамен

Экзамен проходит в письменной форме с последующим собеседованием. Билет включает 1 теоретический вопрос, исчерпывающий ответ по которому оценивается в 5 баллов. Итоговая оценка по дисциплине выставляется в соответствии с системой «Ритм» с учетом оценок текущего контроля.