**Министерство науки и образования Российской Федерации**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение**

**высшего профессионального образования**

**«Московский физико-технический институт (государственный университет)»**

**МФТИ (ГУ)**

**Кафедра «Физика высокотемпературных процессов»**

**«УТВЕРЖДАЮ»**

**Проректор по учебной работе**

**О. А. Горшков**

**2012 г**.

.

**Рабочая УЧЕБНАЯ Программа**

**по дисциплине:** **Теоретические и технические основы численного анализа**

**по направлению:** 010900 «Прикладные математика и физика»

**профиль подготовки:** Физика и химия плазмы

**факультет:** **МБФ**

**кафедра: Физика высокотемпературных процессов**

**курс:** 4 (бакалавриат)

**семестры:** 8 **Экзамен: 8 семестр**

**Трудоёмкость в зач. ед.:** вариативная часть – 3 зач. ед.;

**в т.ч.:**

**лекции:** 32 час.;

**практические (семинарские) занятия:** нет;

**лабораторные занятия:** нет;

**мастер классы, индивид. и групповые консультации:** нет;

**самостоятельная работа:** 32 час.;

**курсовые работы:** нет;

**подготовка к экзамену:** 1 зач. ед.

**ВСЕГО часов 94**

**Программу составил:** к.ф-м.н., Левашов П.Р.

**Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов**

«\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2012 г.

Заведующий кафедрой академик, д.ф.-м.н. В.Е. Фортов

**ОБЪЁМ УЧЕБНОЙ НАГРУЗКИ И ВИДЫ ОТЧЁТНОСТИ.**

|  |  |
| --- | --- |
| **Вариативная часть, в т.ч. :** | \_\_3\_\_ зач. ед. |
| Лекции | \_32\_ часа |
| Практические занятия | \_\_-\_\_ часов |
| Лабораторные работы | \_\_-\_\_ часов |
| Индивидуальные занятия с преподавателем | \_\_-\_\_ часов |
| Самостоятельные занятия, включая подготовку курсовой работы | \_32\_ часа |
| Мастер- классы, индивидуальные и групповые  Консультации | \_\_-\_\_ часов |
| Самостоятельные занятия (работа над коллективными и индивидуальными проектами, курсовые работы) | \_\_-\_\_ часов |
| Подготовка к экзамену | 1 зач. ед. |
| **ВСЕГО** | 94 часа (3 зач. ед.) |
| **Итоговая аттестация** | Экзамен: 8 семестр |

1. **ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ**

Целью освоения дисциплины «Теоретические и технические основы численного анализа» является изучение основ работы с операционной системой UNIX, программирования и решения на компьютерах различных задач вычислительной физики, а также применение полученных знаний и навыков на практике.

**Задачами данного курса являются:**

* изучение основ операционной системы UNIX,
* формирование представлений о языках программирования, изучение особенностей языка программирования C;
* редактирование, компиляция и линковка программ в операционной системе UNIX;
* разработка алгоритма, написание программы, отладка и запуск программ для различных задач вычислительной физики;
* изучение основ параллельного программирования.

1. **Место дисциплины в структуре ООП бакалавриата**

Дисциплина **«Теоретические и технические основы численного анализа»** включает в себя разделы, которые могут быть отнесены к вариативной части профессионального цикла Б.3.

Дисциплина **«Теоретические и технические основы численного анализа»**базируется на материалах курсов бакалавриата: базовая и вариативная часть кода УЦ ООП Б.2**(**математическийестественнонаучный блок) по дисциплинам«Высшая математика» (математический анализ, высшая алгебра, дифференциальные уравнения и методы математической физики), блока «Общая физика» и региональной составляющей этого блока и относится к профессиональному циклу.Освоение курса необходимо для разносторонней подготовки бакалавров к профессиональной деятельности, включающей как проведение фундаментальных исследований, так и постановку и решение инженерных задач с использованием современной компьютерной техники.

1. **Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины**

Освоение дисциплины «Теоретические и технические основы численного анализа» направлено на формирование следующих общекультурных и общепрофессиональных интегральных компетенций бакалавра:

*а) общекультурные (ОК):*

* способность к обобщению, анализу, восприятию информации, постановке целей и выбору путей её достижения, к анализу последствий научной, производственной и социальной деятельности (владение культурой мышления) (ОК-1);
* способность логически верно, аргументировано и ясно строить устную и письменную речь, формировать и аргументировано отстаивать собственную позицию (ОК-2);
* способность находить организационно-управленческие решения в нестандартных ситуациях и готовность нести за них ответственность (ОК-4);
* способность к саморазвитию, повышению квалификации, устранению пробелов в знаниях и самостоятельному обучению в контексте непрерывного образования, способность осваивать новую проблематику, язык, методологию и научные знания в избранной предметной области (ОК-6);
* способность критически оценивать свои достоинства и недостатки, намечать пути и выбирать средства развития достоинств и устранения недостатков (ОК-7);

*б) профессиональные (ПК):*

* способность формализовать и решать отдельные части нестандартной задачи в общей постановке (ПК-1);
* способность к пониманию важности воздействия внешних факторов, и их учёта в ходе исследований и разработок (ПК-2);
* способность применять основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования в физике, химии, экологии, других естественных и социально-экономических науках (ПК-3);
* способность применять базовую лексику и основную терминологию по направлению подготовки, способность к подготовке и редактированию текстов профессионального и социально-значимого содержания на русском и английском языках (ПК-5);
* способность представлять планы и результаты собственной деятельности с использованием различных средств, ориентируясь на потребности аудитории, в том числе в форме отчётов, презентаций, докладов на русском и английском языках (ПК-7);
* способность планировать и проводить простые эксперименты и исследования, выполнять проекты и задания (ПК-9).

1. **конкретные Знания, умения и навыки, формируемые в результате освоения дисциплины**
   1. **Знать:**

* основы устройства современной компьютерной техники и принципы работы современных операционных систем;
* основные принципы работы и основные команды операционной системы UNIX;
* классификацию языков программирования, требования к языкам программирования для их использования при моделировании задач вычислительной физики;
* принципы структурного программирования;
* основы процесса компиляции и линковки программ;
* классификацию многопроцессорных вычислительных комплексов;
* основные принципы создания параллельных программ для многопроцессорных вычислительных комплексов с распределенной памятью;
* основные принципы создания параллельных программ для многопроцессорных вычислительных комплексов с общей памятью.
  1. **Уметь:**
* работать с файловой системой операционной системы UNIX в терминальном режиме;
* редактировать файлы программ с помощью стандартных редакторов операционной системы UNIX;
* уметь пересылать файлы между компьютерами различными способами;
* программировать на языках C и/или FORTRAN;
* компилировать и линковать программы, написанные с привлечением стандартных библиотек;
* создавать собственные библиотеки подпрограмм и использовать их для написания и компиляции собственных программ;
* использовать библиотеку GSL для решения стандартных задач вычислительной математики;
* разрабатывать алгоритмы в соответствии с принципами структурного программирования;
* разрабатывать простые параллельные алгоритмы, создавать простые параллельные программы для компьютеров с общей и распределенной памятью;
* запускать параллельные программы на многопроцессорных вычислительных комплексах;
* эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и экспериментальных результатов.
  1. **Владеть:**
* навыками освоения большого объема информации;
* навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
* культурой постановки и моделирования физических задач;
* навыками грамотной обработки результатов экспериментов и сопоставления с теоретическими и литературными данными;
* практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач;
* практикой работы в операционной системе UNIX, включая написание, редактирование, отладку и запуск последовательных и параллельных программ.

1. **Структура и содержание дисциплины**
   1. **Структура преподавания дисциплины**

**Перечень разделов дисциплины и распределение времени по темам**

|  |  |
| --- | --- |
| № темы и название | Количество часов |
| 1. Основы операционной системы UNIX и программирования в этой системе | 24 |
| 2. Моделирование различных физических задач | 28 |
| 3. Введение в параллельное программирование на современных суперкомпьютерных комплексах | 12 |
| ВСЕГО( зач. ед.(часов)) | 64 часа (2 зач. ед.) |

**Лекции:**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п.п. | Темы | Трудоёмкость  (количество часов) |
| 1 | Основы операционной системы UNIX. История, принципы, влияние на другие операционные системы. Структура операционной системы UNIX. | 2 |
| 2 | Основные команды операционной системы UNIX. Работа в командной строке, командный процессор bash. Файловая система операционной системы UNIX, работа с файлами и каталогами, права на файлы и каталоги. | 2 |
| 3 | Процессы в операционной системе UNIX. Способы управления процессами с помощью сигналов, соответствие некоторых сигналов клавиатурным комбинациям. Понятия о потоках в рамках процесса. | 2 |
| 4 | Редактирование файлов, основы редактора vi. Классификация языков программирования, требования к языкам программирования для написания вычислительных программ. Особенности языков программирования FORTRAN и C. | 2 |
| 5 | Компиляция программ на языке C. Основные этапы компиляции, ключи компилятора gcc на каждом этапе компиляции. Ошибки компиляции на каждом из этапов. Понятие о библиотеках, способы создания и работы с библиотеками. | 3 |
| 6 | Система компиляции программ MAKE. Зависимости между файлами, цели, обработка зависимостей. Команда make. | 2 |
| 7 | Принципы структурного программирования. Способы объединения блоков, стандартные блоки. Примеры структурных и неструктурных программ. Отступления от принципов структурного программирования. | 3 |
| 8 | Моделирование случайных процессов. Понятие о методе Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Задача о перколяции. | 4 |
| 9 | Одномерная модель Изинга. Аналитические формулы для энергии, магнитного момента и теплоемкости. Моделирование одномерной модели Изинга. | 4 |
| 10 | Двумерная модель Изинга. Понятие о фазовом переходе второго рода. Расчет теплоемкости в двумерном случае, зависимость результатов от параметров моделирования, оценка погрешности моделирования. | 4 |
| 11 | Понятие о параллельном программировании. Суперкомпьютеры с распределенной памятью. Библиотека MPI, межпроцессорные обмены. Написание, отладка и запуск параллельных задач. | 2 |
| 12 | Понятие о программировании с общей памятью, технология OpenMP. Краткое описание современных технологий, которые необходимо освоить для эффективного численного моделирования различных физических задач. | 2 |
| ВСЕГО (зач. ед. (часов)) | | 32 часа (1 зач. ед.) |

**Самостоятельная работа:**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п.п. | Темы | Трудоёмкость  (количество часов) |
| 1 | Основы операционной системы UNIX. История, принципы, влияние на другие операционные системы. Структура операционной системы UNIX. | 2 |
| 2 | Основные команды операционной системы UNIX. Работа в командной строке, командный процессор bash. Файловая система операционной системы UNIX, работа с файлами и каталогами, права на файлы и каталоги. | 2 |
| 3 | Процессы в операционной системе UNIX. Способы управления процессами с помощью сигналов, соответствие некоторых сигналов клавиатурным комбинациям. Понятия о потоках в рамках процесса. | 2 |
| 4 | Редактирование файлов, основы редактора vi. Классификация языков программирования, требования к языкам программирования для написания вычислительных программ. Особенности языков программирования FORTRAN и C. | 2 |
| 5 | Компиляция программ на языке C. Основные этапы компиляции, ключи компилятора gcc на каждом этапе компиляции. Ошибки компиляции на каждом из этапов. Понятие о библиотеках, способы создания и работы с библиотеками. | 3 |
| 6 | Система компиляции программ MAKE. Зависимости между файлами, цели, обработка зависимостей. Команда make. | 2 |
| 7 | Принципы структурного программирования. Способы объединения блоков, стандартные блоки. Примеры структурных и неструктурных программ. Отступления от принципов структурного программирования. | 3 |
| 8 | Моделирование случайных процессов. Понятие о методе Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Задача о перколяции. | 4 |
| 9 | Одномерная модель Изинга. Аналитические формулы для энергии, магнитного момента и теплоемкости. Моделирование одномерной модели Изинга. | 4 |
| 10 | Двумерная модель Изинга. Понятие о фазовом переходе второго рода. Расчет теплоемкости в двумерном случае, зависимость результатов от параметров моделирования, оценка погрешности моделирования. | 4 |
| 11 | Понятие о параллельном программировании. Суперкомпьютеры с распределенной памятью. Библиотека MPI, межпроцессорные обмены. Написание, отладка и запуск параллельных задач. | 2 |
| 12 | Понятие о программировании с общей памятью, технология OpenMP. Краткое описание современных технологий, которые необходимо освоить для эффективного численного моделирования различных физических задач. | 2 |
| 13 | Подготовка к экзамену | 1 зач. ед. |
| ВСЕГО (зач. ед. (часов)) | | 32 часа (1 зач. ед.) + 1 зач. ед. |

* 1. **Содержание дисциплины**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| №  п/п | Название модулей | Разделы и темы лекционных занятий | Содержание | Объем | |
| Аудиторная работа  (часы) | Самостоятельная работа  (часы) |
| 1 | I  основы операционной системы UNIX и программирования в этой системе | **Основы ОС UNIX** | Основы операционной системы UNIX. История, принципы, влияние на другие операционные системы. Структура операционной системы UNIX. | 2 | 2 |
| 2 | **Работа в командной строке ОС UNIX.** | Основные команды операционной системы UNIX. Работа в командной строке, командный процессор bash. Файловая система операционной системы UNIX, работа с файлами и каталогами, права на файлы и каталоги. | 2 | 2 |
| 3 | **Процессы в ОС UNIX** | Процессы в операционной системе UNIX. Способы управления процессами с помощью сигналов, соответствие некоторых сигналов клавиатурным комбинациям. Понятия о потоках в рамках процесса. | 2 | 2 |
| 4 | **Языки программирования для численного моделирования** | Редактирование файлов, основы редактора vi. Классификация языков программирования, требования к языкам программирования для написания вычислительных программ. Особенности языков программирования FORTRAN и C. | 2 | 2 |
| 5 | **Компиляция программ в ОС UNIX** | Компиляция программ на языке C. Основные этапы компиляции, ключи компилятора gcc на каждом этапе компиляции. Ошибки компиляции на каждом из этапов. Понятие о библиотеках, способы создания и работы с библиотеками. | 3 | 3 |
| 6 | II  моделирование различных физических задач | Система компиляции программ MAKE | Система компиляции программ MAKE. Зависимости между файлами, цели, обработка зависимостей. Команда make. Пример компиляции реального проекта. | 2 | 2 |
| 7 | **Принципы структурного программирования** | Принципы структурного программирования. Способы объединения блоков, стандартные блоки. Примеры структурных и неструктурных программ. Отступления от принципов структурного программирования. | 3 | 3 |
| 8 | **Моделирование случайных процессов** | Моделирование случайных процессов. Понятие о методе Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса. Задача о перколяции. | 4 | 4 |
| 9 |  | **Одномерная и двумерная модели Изинга** | Одномерная модель Изинга. Аналитические формулы для энергии, магнитного момента и теплоемкости. Моделирование одномерной модели Изинга. | 4 | 4 |
| 10 |  | Методы расчета твердой фазы | Двумерная модель Изинга. Понятие о фазовом переходе второго рода. Расчет теплоемкости в двумерном случае, зависимость результатов от параметров моделирования, оценка погрешности моделирования. | 4 | 4 |
| 11 | III  введение в ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ ПРОГРАММИРОВАНИЕ На СОВРЕМЕННЫХ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ КОМПЛЕКСАХ | **Параллельное программирование с распределенной памятью** | Понятие о параллельном программировании. Суперкомпьютеры с распределенной памятью. Библиотека MPI, межпроцессорные обмены. Написание, отладка и запуск параллельных задач. | 2 | 2 |
| 12 | Параллельное программирование с общей памятью | Понятие о программировании с общей памятью, технология OpenMP. Краткое описание современных технологий, которые необходимо освоить для эффективного численного моделирования различных физических задач. | 2 | 2 |

1. **Образовательные технологии**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Вид занятия | Форма проведения занятий | Цель |
| 1 | лекция | изложение теоретического материала | получение теоретических знаний по дисциплине |
| 2 | лекция | изложение теоретического материала с помощью презентаций | повышение степени понимания материала |
| 4 | самостоятельная работа студента | подготовка к экзамену и зачету с оценкой | повышение степени понимания материала |

1. **Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

**Контрольно-измерительные материалы**

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена в 8-ом семестре.

1. Основные принципы, положенные в основу операционной системы UNIX.
2. Структура операционной системы UNIX.
3. Файловая система операционной системы UNIX.
4. Понятие о процессе, способы управления процессами.
5. Основные этапы компиляции программ на языке C.
6. Ключи компиляции компилятора gcc на этапе препроцессирования, практический пример.
7. Ключи компиляции компилятора gcc на этапе компилирования, практический пример.
8. Ключи компиляции компилятора gcc на этапе линковки, практический пример.
9. Статическая и динамическая линковки. Продемонстрировать на примере.
10. Технология компиляции MAKE. Продемонстрировать на примере.
11. Принципы структурного программирования. Понятие о блоках, способы их комбинирования.
12. Привести примеры алгоритмов, написанных в соответствии/без соответствия с принципами/принципам структурного программирования.
13. Привести примеры, в которых нарушение принципов структурного программирования оправдано. Привести примеры нарушения принципов структурного программирования в языке C.
14. Понятие о датчике случайных чисел, свойства датчиков, критичные для задач численного моделирования.
15. Алгоритмы генерации случайных чисел с заданным распределением.
16. Марковские процессы, алгоритм Метрополиса.
17. Понятие о методе Монте-Карло, метод численного интегрирования с использованием метода Монте-Карло.
18. Понятие о перколяции и бесконечном кластере.
19. Алгоритм нахождения бесконечного кластера на прямоугольной решетке. Порог перколяции в двумерном случае.
20. Задача о случайных блужданиях в одномерном и двумерном случаях.
21. Одномерная модель Изинга, формула для вычисления энергии, магнитного момента и теплоемкости.
22. Алгоритм моделирования ферромагнетика в модели Изинга в каноническом ансамбле с помощью алгоритма Метрополиса.
23. Расчет средней энергии и магнитного момента в одномерной модели Изинга.
24. Расчет теплоемкости в двумерной модели Изинга. Фазовый переход второго рода (ферромагнетик-парамагнетик).
25. Суперкомпьютеры с распределенной памятью. Технология программирования для компьютеров с распределенной памятью, библиотека MPI. Практический пример параллельного алгоритма для задачи численного интегрирования.
26. Суперкомпьютеры с общей памятью. Потоки, технология программирования OpenMP. Практический пример параллельного алгоритма для задачи численного интегрирования.
27. Практическая задача: численное решение задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения с заданной точностью с помощью библиотеки GSL.
28. Практическая задача: вычисление определенного интеграла с помощью библиотеки GSL с заданной точностью.
29. Практическая задача: вычисление несобственного интеграла с помощью библиотеки GSL с заданной точностью.
30. Практическая задача: вычисление суммы ряда с заданной точностью с помощью библиотеки GSL.
31. Практическая задача: интерполяция заданного множества точек функции кубическим сплайном и вычисление производной интерполяционной функции в заданной точке с помощью библиотеки GSL.
32. Практическая задача: нахождение всех корней алгебраического уравнения с помощью библиотеки GSL.
33. Практическая задача: решение системы линейных уравнений с помощью библиотеки GSL.
34. **Материально-техническое обеспечение дисциплины**
    1. **Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:** компьютер и мультимедийное оборудование (проектор), доступ к сети Интернет
35. **Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**
    1. **Основная литература**
36. Юрий Магда. UNIX. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2006.
37. Дейтел Х.М., Дейтел П.Дж. Как программировать на C. М.: Бином, 2009.

**Дополнительная литература**

1. Стен Келли-Бутл. Введение в UNIX. М.: «Лори», 1997.
2. Керниган Б., Ритчи Д. Язык программирования C. Санкт-Петербург: Финансы и статистика, 2001.
3. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990.
4. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990.
5. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2002.

**Электронные ресурсы, включая доступ к базам данных и т.д.**

1. Библиотека GSL, <http://www.gnu.org/software/gsl/>
2. Компиляция программ на языке C/C++, http://www.firststeps.ru/linux/

Программу составил

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (Левашов П.Р., к.ф.-м.н.)

«\_\_\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_2012 г.