

Вычислительная физика

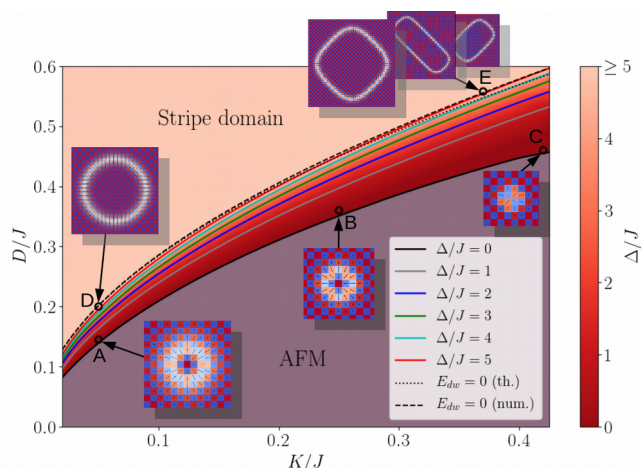
1. **Название:** Вычислительная физика

2. **Лектор:** Д. Р. Гулевич, PhD

Ассистент: Я. В. Жумагулов

(На рисунке: диаграмма состояний скирмиона в антиферромагнитном материале, численный расчёт)

3. **Краткая аннотация:**



Развитие современной физики было бы немислимо без численных расчётов. Вычисления на высокопроизводительных компьютерах используются для расчета свойств молекул и атомных кластеров в квантовой химии, определения зонной структуры материалов, электронных и оптических свойств материалов в теории конденсированного состояния, моделирования образования глобальной структуры Вселенной и высокоэнергетических процессов в недрах звёзд в астрофизике.

Вычислительная физика представляет собой быстро развивающуюся дисциплину. Ещё не так давно, во время, когда было написано большинство существующих учебников по численным методам, пользователю приходилось самому писать программный код для рутинных операций таких как поиск собственных значений матриц, интерполяция функций, численное интегрирование, поиск минимума и корней функции, решение линейных уравнений, в то время как сегодня это делается вызовом несложной команды Python или высоко оптимизированных численных библиотек линейной алгебры BLAS и LAPACK, конкурировать с которыми в производительности обычному пользователю сегодня нет ни малейшего смысла. В связи с этим, современная вычислительная физика постепенно становится всё более высокоуровневой, где многие операции, которые в прошлом требовало алгоритмов, сведены к использованию нескольких высокоуровневых команд. С другой стороны, огромная область вычислительной физики -- решение дифференциальных уравнений в частных производных не поддаётся инкапсуляции в рамки универсальных команд или программ. В отдельных случаях оправдано использование сугубо специализированных солверов для решения некоторых видов дифференциальных уравнений, однако, в подавляющем большинстве случаев, каждое дифференциальное уравнение требует индивидуального подхода и разработки кода на "низкоуровневых" языках C и FORTRAN (прим. -- низкоуровневых относительно высокоуровневого Python) .

Таким образом, задача современной курса по вычислительной физике состоит в том, чтобы предоставить студенту из огромного накопленного по сей день инструментария вычислительных методов именно те, которые на сегодняшний день смогут пригодятся ему в ходе научных исследований; обозначить ситуации, где крайне желательно написание собственного программного кода на языках Python, C/C++ или FORTRAN, и наоборот, обозначить те, в которых конкурировать с библиотеками BLAS и LAPACK не имеет ни малейшего смысла.

После прохождения курса студент приобретёт навыки работы в операционной системе Linux и владения инструментами Python в применении к научным расчётам, научится пользоваться численными библиотеками линейной алгебры BLAS и LAPACK, собирать собственные модули Python и оптимизированные библиотеки на языке C, разовьёт умение разрабатывать численные схемы, оценивать применимость и точность численного метода, предлагать решение физических задач при помощи инструментария Python, ускорять наиболее трудоёмкие части программного кода с применением параллельного программирования и приобретёт навыки работы на суперкомпьютерном кластере.

4. Название программы и семестр: Квантовые материалы, 2й семестр.

5. Требования к подготовке: Данный курс предполагает знакомство студента с численными методами, основами программирования, квантовой механикой и физикой конденсированного состояния в объёме бакалаврских курсов "Программирование", "Численные методы", "Квантовая механика" и "Физика конденсированного состояния" читаемых на Физико-Техническом Факультете Университета ИТМО.

6. Содержание курса:

| 1. Введение в современную вычислительную физику. | |
|--|-------------------|
| <ul style="list-style-type: none"> Операционная система Linux. Язык программирования Python. Интерактивная среда Jupyter Notebook. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> Постпроцессинг и визуализация научных результатов. Картинки и анимация в Python. Используем Python вместо Gnuplot и Origin. | Лекция + Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Управление версиями программ. Введение в систему контроля версий Git и веб-хостинг проектов GitHub. | Лекция + Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Язык C в XXI веке. Что лучше: C или Python? Компиляция динамически встраиваемой библиотеки на C. Отладка, профайлинг и оптимизация программного кода. | Лекция + Практика |
| 2. Математика Питона. Что скрыто за названиями инструментов Python? | |
| <ul style="list-style-type: none"> Возможности Python: решение алгебраических уравнений и решение систем линейных уравнений в Python. Задачи оптимизации. Интерполяция. Численное интегрирование и дифференцирование. Квадратурные формулы. Преобразование Фурье и другие. Спец. функции. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> Математика Питона. | Практика |
| 3. Матрица -- основа численных расчётов | |
| <ul style="list-style-type: none"> Матричные вычисления в Python. Плотные и разреженные матрицы. Схемы хранения матриц. Библиотеки линейной алгебры BLAS и LAPACK. | Лекция + Практика |
| 4. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений | |
| <ul style="list-style-type: none"> Решение обыкновенных дифференциальных уравнений методом конечных разностей. Численные схемы. Порядок и устойчивость численной схемы. Построение явных и неявных численных схем. | Лекция |
| 5. Численное решение дифференциальных уравнений в частных производных | |
| <ul style="list-style-type: none"> Типы дифференциальных уравнений в частных производных. Решение уравнений теплопроводности. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> Решение волновых уравнений. Метод расщепления. Решение эллиптических уравнений методом конечных элементов (FEM). | Лекция |

| 6. Вычислительная квантовая химия | |
|---|-------------------|
| <ul style="list-style-type: none"> Атом водорода и уравнение Шредингера. Теория функционала плотности и ab initio методы квантовой химии. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> GPAW: теория функционала плотности на Python. | Лекция |
| 7. Вычислительная физика конденсированных сред | |
| <ul style="list-style-type: none"> Теория функционала плотности в физике конденсированных сред. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> Экситон-поляритоны в двумерных квантовых ямах. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Двумерный электронный газ. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Скирмионы в магнитных средах. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Солитоны синус-Гордона в сверхпроводящих контактах. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Краевые моды в топологических изоляторах. | Практика |
| 8. Вычислительная астрофизика | |
| <ul style="list-style-type: none"> Симуляция спиральных рукавов галактики. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Задача N тел в астрономии. Испарение шарового звездного скопления. | Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Вычислительная теория относительности. Распространение гравитационных волн. | Практика |
| 9. Метод Монте-Карло | |
| <ul style="list-style-type: none"> Интегрирование методом Монте-Карло. Моделирование случайных процессов. Алгоритм Метрополиса. Квантовый метод Монте-Карло. | Лекция + Практика |
| 10. Магические трюки в численных методах | |
| <ul style="list-style-type: none"> Устойчивость и неустойчивость. Аппроксимация Паде. | Лекция |
| <ul style="list-style-type: none"> Алгоритм Одинцова-Семенова-Зорина для решения интегро-дифференциальных уравнений. | |
| 11. Высокопроизводительные вычисления | |
| <ul style="list-style-type: none"> Ускорение параллельных вычислений с использованием OpenMP. Ускорение вычислений с использованием графических карт NVIDIA GPU. | Лекция + Практика |
| <ul style="list-style-type: none"> Основы работы на суперкомпьютерном кластере. Введение в интерфейс обмена данных MPI. | Лекция + Практика |

7. Список основной литературы

1. С. Граннеман, "Linux, карманный справочник", М.: Издательский дом "Вильямс", 2009.

2. Б. Клеменс, "Язык С в XXI веке", М.: ДМК Пресс, 2018.
3. R. Johansson, "Numerical Python: A Practical Techniques Approach for Industry", eBook.
4. В. А. Ильина и П. К. Силаев, "Численные методы для физиков-теоретиков", Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004.
5. В. И. Киреев и А. В. Пантелеев, "Численные методы в примерах и задачах" 3-е изд., М.: Высш. шк., 2008.
6. D. R. Lynch, "Numerical Partial Differential Equations for Environmental Scientists and Engineers: A First Practical Course", Springer Science+Business Media Inc., 2005.
7. Я. В. Жумагулов и А. В. Красавин, "Компьютерный практикум в среде matlab: учебное пособие для вузов" 2-е изд., М.: Издательство Юрайт, 2018.
8. В.А. Кашурников и А.В. Красавин, "Численные методы квантовой статистики", 2-ое изд., Москва, Изд-во Физматлит, 2010.