

индивидуальное помещение с выходом в Интернет, постоянно перемещающееся в виртуальном пространстве.

Грид-службы, и обучение с помощью мобильных устройств на сегодняшний день стали популярными благодаря их возможностям. Оба эти подхода стали необходимыми в современной жизни. Они подходят нашему быстрому образу жизни, неразрывно связанному с доступом, получением и использованием информации.

Грид-службы обеспечивают такими службами, которые необходимы в нашей работе или деятельности. У них много преимуществ в разных областях таких, как развлечения, образование, правительственное, военное дело, политика, статистика и др. Грид-обучение делает обучение с помощью мобильных устройств более возможным. Однако, грид-службы до настоящего времени модернизируются. Таким образом, в будущем они станут более усовершенствованными относительно характеристики мобильного обучения и решения больших задач. Использование грид-служб делает обучение с помощью мобильных устройств очень нужной вещью для всех, несмотря на профессию человека или задачу, которая стоит перед таким устройством.

Библиографический список

1. Трайнев В. А., Гуркин В. Ф., Трайнев О. В. Дистанционное обучение и его развитие. М.: Дашков и Ко, 2012.
2. Millard, D., Woukeu, A., Tao, F. B., & Davis, H. (2005). The Potential of Grid for Mobile e-Learning (Poster). In Proceedings of The 4th World Conference on Mobile Learning (MLEARN 2005), Cape Town, South Africa.

Ю.С. Митрохин

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ И ОБРАЗОВАНИИ

mit@uni.udm.ru

Удмуртский государственный университет, г. Ижевск

The first-principles (ab initio) calculations methods are used for simulation the physical mechanical and chemical properties of solids liquids and molecules, The modern supercomputers and multi-processor parallel clusters are used for this calculations. The many modern and efficient packages with open source code are available now in Internet. Many of them are free (GNU licenses) and other are commercial. They may be used also in the education and it is possible use them for prepare the specialists on the modern international level in different scientific specialities. The new information technologies based on the modern software and hardware are used in Udmurt State Universities.

Методы моделирования в физике, химии и в других областях знаний требуют очень больших вычислительных затрат и предъявляют жесткие требования к имеющейся у исследователя вычислительной технике. Наиболее популярными методами моделирования в физике и химии были методы молекулярной динамики (MD) и Монте Карло (MC). Однако там основной проблемой была проблема выбора потенциала межатомного взаимодействия. От этого во многом зависели результаты моделирования. После появления в 1985 году пионерской работы Car и Parinello [1], где авторы предложили новый метод моделирования, получивший название метода первопринципной (ab initio) молекулярной динамики (CPMD),

наблюдается резкое увеличение публикаций с использованием этого метода. В этом методе решается задача расчета распределения электронной плотности в изучаемой системе с помощью квантово-механических методов (уравнения Кона-Шема [2]), затем силы межатомного взаимодействия находятся по теореме Геллмана-Фейнмана путем дифференцирования электронной плотности. Очевидно, что вычислительные затраты в этом случае возрастают на несколько порядков, и такая задача уже не может быть решена на обычном бытовом компьютере. До недавнего времени эти задачи решались на мощных суперкомпьютерах типа CRAY. Но даже и в этом случае число атомов в моделируемой системе не превышало 100.

Бурное развитие развитие вычислительной техники привело к тому, что в настоящее время появились многопроцессорные кластеры на базе процессоров Intel и AMD, которые стали доступными для многих организаций. С 2000 года в УдГУ работает 12-процессорный кластер PARK на основе ПК Pentium 4 в учебно-научной лаборатории параллельных вычислений. В 2009 году в УдГУ был запущен параллельный кластер на процессорах Intel (56 ядер). Он в настоящее время используется в учебном процессе, а также и научных исследованиях. Кластер работает под управлением операционной системы LINUX (Debian). Он доступен по внутренней сети из любого компьютера в УдГУ. В 2011 году в УдГУ было издано методическое пособие для всех пользователей этого кластера [3]. Ее электронная копия доступна на сайте УдГУ [4]. В октябре 2011 года двое сотрудников УдГУ М.А. Ключков и С.А. Мельчуков прошли курсы повышения квалификации в Южно-Уральском государственном университете (ЮрГУ) в г. Челябинске. По окончании курсов они получили соответствующие сертификаты. Вскоре после этого они провели аналогичные курсы для студентов. С.А. Мельчуков провел занятия в УдГУ, а М.А. Ключков - в филиале УдГУ в г. Гибкинский Тюменской области. Все студенты прошли тестирование в режиме online на кластере ЮрГУ и тоже получили сертификаты.

В учебно-научной лаборатории параллельных вычислений в УдГУ были выполнены работы по моделированию жидких металлов (Al, Ni, Cu, Cs) и их сплавов (Ni_3Al), а также численные эксперименты по моделированию физико-механических свойств металлов и сплавов. Например, типичное время моделирования одного варианта процесса плавления металла на 8 процессорах кластера PARK составляло около 15-20 дней, а максимальная производительность достигалась на 6 – 8 процессорах. Здесь следует сказать, что в этих расчетах использовался один из самых эффективных пакетов ab initio MD – Венский пакет VASP [5]. Это коммерческий пакет, его стоимость в настоящее время составляет 3000 \$. Количество атомов в суперячейке колебалось в пределах 32-64.

В настоящее время проводятся расчеты для Ni_3Al на кластере umt (1660 ядер) в Институте математики и механики ИММ УрО РАН в г. Екатеринбурге. В этих расчетах используется пакет CPMD [6]. Этот пакет доступен бесплатно для академических организаций, но требует предварительной регистрации и подтверждения о том, что он не будет использован в ядерных исследованиях. Линейные размеры суперячейки были увеличены в два раза по сравнению с кластером PARK, а число атомов в ней стало 256 вместо 32. Число используемых ядер на кластере umt было 128, при этом достигалась оптимальная производительность и время счета. Время моделирования одной точки по температуре составляло 30-60 часов. Число таких точек более 10. Из этого сравнения можно

сделать вывод, что даже наличие мощного вычислительного кластера не позволяет значительно увеличить количество атомов в расчетной области. Поэтому методы классической молекулярной динамики не утратили своего значения, они просто дополняют друг друга.

Многие ведущие ВУЗ'ы страны в настоящее время имеют многопроцессорные вычислительные кластеры, что позволяет выполнять сложные научные расчеты. Однако, наличие только одного "железа" не решает проблему. Она состоит в том, то для успешного выполнения указанных выше работ, нужно специальное и довольно сложное матобеспечение, а также нужны специалисты обладающие необходимой квалификацией. Оказалось, что эту проблему решить гораздо труднее, чем покупка дорогого "железа". Таких специалистов нужно готовить по специальным программам и с широким использованием практических методов работы на параллельных вычислительных комплексах. В УдГУ выполнено несколько дипломных работ по молекулярной динамике, квантовой химии и параллельному программированию. Наш научный и педагогический опыт работы в этой области знаний говорит, что только непосредственное участие студентов в научных работах вместе с руководителем позволяет подготовить специалистов высокого класса, способных дальше к самостоятельной научной работе. Если же преподаватель, не участвует в научной работе, то он не сможет научить этому и студентов. Следует заметить, что и студенты хорошо это понимают.

Библиографический список

1. *Car R., Parinello M.*, Phys. Rev. Let., **55**, 2471 (1985).
2. *Kohn W., Sham L.J.*, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
3. *Клочков М.А., Марков К.Ю., Митрохин Ю.С., Чиркова Л.С.* Организация параллельных вычислений для решения дифференциальных уравнений на blade-сервере / учебно-методическое пособие, УдГУ, Ижевск, 2011, 79с.
4. <http://udsu.ru>
5. *Kresse G., J.Futhmuller J.* / Comp. Mat. Sci., **6**, 15 (1996).
6. <http://www.cpmid.ru>

С.А. Михайличенко МНОГОУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА ОТКРЫТОГО ОБРАЗОВАНИЯ БГТУ ИМ. В.Г. ШУХОВА КАК СТРАТЕГИЧЕСКАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ РАЗВИТИЯ ВУЗА В МИРОВОМ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

dist@intbel.ru

*Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова, г.
Белгород*

The article deals with complex system of distance education in Belgorod Shukhov State Technological University. On the base of this system Institute of distance education implements innovation Project of introduction innovative multilevel open education system in university. This system gives to the students and listeners opportunity to study many programs of different level (FGES-3 and level education) in any geographical place with individual time-table and comfortable time. The main purposes of this system are socially significant factors among them: possibility of education for disabled, housewives and people who have children, soldiers and soldiers of active duty service and also the wide category of people who are working far from the university.