

Программа учебной дисциплины «Программирование сложных вычислений»

Утверждена

Академическим советом ООП

Протокол номер 3 от 29 мая 2018

Авторы	Е. А. Буровский, eburovskiy@hse.ru
Число кредитов	4
Контактная работа (час.)	60
Самостоятельная работа (час.)	92
Курс	1
Формат изучения дисциплины	Без использования онлайн курса

1 Область применения и нормативные ссылки

Настоящая программа учебной дисциплины устанавливает требования к образовательным результатам и результатам обучения студента и определяет содержание и виды учебных занятий и отчетности.

Программа предназначена для преподавателей, ведущих дисциплину «Программирование сложных вычислений», учебных ассистентов и студентов, обучающихся по образовательной программе 01.04.04 Системы управления и обработки информации в инженерии, по образовательной программе 01.04.04 Суперкомпьютерное моделирование в науке и инженерии.

Программа учебной дисциплины разработана в соответствии с:

ФГОС ВПО по направлению подготовки 01.04.04 «Прикладная математика» (квалификация (степень) «магистр»).

Объединенным планом на 2018/19 учебный год Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ 01.04.04 Системы управления и обработки информации в инженерии, Магистратура 1 курс.

Объединенным планом на 2018/19 учебный год Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ 01.04.04 Суперкомпьютерное моделирование в науке и инженерии Магистратура 1 курс.

2 Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Программирование сложных вычислений» являются развитие магистрантом навыков реализации различных вычислительных моделей на языке программирования Python или ином ранее изученном магистрантом языке высокого уровня с использованием современных средств разработки.

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

[Компетенции для программы учебной дисциплины берутся из стандартов: ФГОС/ ОС НИУ ВШЭ для соответствующего уровня и направления подготовки и из числа закрепленных за дисциплиной в матрице компетенций образовательной программы] Уровни формирования компетенций:

РБ — ресурсная база, в основном теоретические и предметные основы (знания, умения); **СД** – способы деятельности, составляющие практическое ядро данной

компетенции; **МЦ** – мотивационно-ценностная составляющая, отражает степень осознания ценности компетенции человеком и готовность ее использовать

В результате освоения дисциплины студент осваивает компетенции:

Компетенция	Код по ОС ВШЭ	Уровень формирования компетенции	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенции	Форма контроля уровня сформированности компетенции
Способность к абстрактному мышлению	ОК-1	СД	Демонстрирует способность к анализу информации и синтезу математической модели	Работа в аудитории, самостоятельная работа	Текущий контроль успеваемости
Готовность к	ОК-3	МЦ	Демонстрирует способность	Самостоятельна	Текущий

Компетенция	Код по ОС ВШЭ	Уровень формирования компетенции	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенции	Форма контроля уровня сформированности компетенции
саморазвитию, самореализации, развитию творческого потенциала			к самостоятельному образованию	я работа	контроль успеваемости
Способность разрабатывать эффективные математические методы решения задач естествознания, техники, экономики и управления	ОПК-2	СД	Демонстрирует способность разрабатывать сложные алгоритмы на основе представленных в литературе и программно их реализовывать.	Практическая работа в аудитории, в компьютерном классе, самостоятельная работа	Текущий контроль успеваемости, экзамен
Способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов (в соответствии с целями ООП магистратуры)	ПК-4	СД	При разработке приложений использует современные среды программирования и средства разработки, пакеты программ.	Практические занятия в компьютерном классе, самостоятельная работа	Текущий контроль успеваемости, экзамен
Способность разрабатывать и исследовать математические модели объектов, систем, процессов и технологий, предназначенных для проведения расчетов, анализа, подготовки решений	ПК-7	СД	Самостоятельно разрабатывает вычислительные модели	Практические занятия в компьютерном классе, самостоятельная работа	Текущий контроль успеваемости, экзамен

4 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Настоящая дисциплина относится к циклу адаптационных дисциплин.

Для освоения учебной дисциплины студенты должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

- Математический анализ
- Линейная алгебра
- Дифференциальные уравнения
- Теория вероятностей

Физика

Владение навыками программирования на любом языке программирования высокого уровня

Основные положения дисциплины должны быть использованы в дальнейшем при изучении дисциплин:

Дипломное проектирование

6 Формы контроля знаний студентов

Тип контроля	Форма контроля	1 год				Кафедра/подразделение	Параметры
		1	2	3	4		
Итоговый	Экзамен		+			ДПМ	Защита программного продукта, реализующего расчет вычислительной модели (30 минут)

7 Критерии оценки знаний, навыков

Экзамен (во 2 модуле): Студент должен продемонстрировать умение создавать компьютерные программы на основе информации по темам курса (компетенции ОПК-2, ПК-4, ПК-7).

Оценки по всем формам текущего контроля выставляются по 10-ти балльной шкале.

Проведение контроля должно осуществляться в компьютерном классе.

8 Содержание дисциплины

Раздел 1. Предмет вычислительной математики. Построение вычислительных модулей программных комплексов.

Использование языка программирования Python и библиотеки NumPy. Решение нелинейных уравнений: расчетные схемы бисекции, секущих, Ньютона. Метод простой итерации. Корни многочленов. Использование библиотеки SciPy.

Раздел 2. Конечно-разностные схемы.

Построение конечно-разностных схем численного дифференцирования. Ошибки дискретизации и округления. Центральные и односторонние разностные схемы. Построение схем высших порядков.

Раздел 3. Вычислительная линейная алгебра.

Матричные разложения LU , QR , SVD . Решение систем линейных уравнений. Задачи на собственные значения. Линейная задача наименьших квадратов.

Раздел 4. Интегрирование функций, решение интегральных уравнений.

Стандартные квадратурные формулы. Простейшие адаптивные квадратуры. Ортогональные многочлены, квадратуры Гаусса. Классификация интегральных уравнений. Методы решения уравнений Фредгольма второго рода.

Раздел 5. Разностные схемы для решения дифференциальных уравнений.

Задача Коши и краевая задача. Методы Эйлера, Рунге-Кутты, предиктор-корректор и др.

Раздел 6. Создание компилируемых расширений языка Python.

Использование языка Cython для написания расширений и сопряжения с расширениями, написанными на C и C++.

Раздел 7. Стохастические алгоритмы моделирования.

Интегрирование в многомерных пространствах. Метод Монте-Карло. Метод Метрополиса. Применение методов Монте-Карло к задачам статистической физики.

9 Образовательные технологии

Занятия проводятся в компьютерных классах, оснащенных необходимым программным обеспечением (системой Anaconda Python, компиляторами языков C и C++), а также проектором. Занятия включают в себя обсуждения и решение практических задач на ЭВМ.

9.1 Методические рекомендации преподавателю

Не предусмотрены.

9.2 Методические указания студентам

Не предусмотрены.

10 Оценочные средства для текущего контроля и аттестации студента

10.1 Оценочные средства для оценки качества освоения дисциплины в ходе текущего контроля

Примеры вопросов для самопроверки студентов.

1. Привести пример функции, производную которой нельзя вычислить методом комплексного шага.
2. Описать методику построения квадратурных формул для вычисления одномерных интегралов.
3. Описать методику вычисления корней многочленов.
4. Обсудить методы решения интегральных уравнений Фредгольма второго рода.
5. Описать применение метода Метрополиса для вычисления термодинамических функций спиновых моделей.
6. Построить разностную схему для решения задачи Коши для уравнений небесной механики.

10.2 Примеры заданий промежуточной аттестации

Примеры заданий для защиты на экзамене.

1. Написать программу интегрирования функции в N-мерном пространстве.
2. Написать программу вычисления производной функции с использованием экстраполяции к нулевому шагу.
3. Написать программу вычисления зависимости объема от давления при постоянной температуре для газа ван-дер-Ваальса.
4. Написать программу, вычисляющую намагниченность модели Изинга как функцию температуры.
5. Написать программу решения уравнение Фредгольма второго рода.
6. Написать программу расчета распространения тепла в одномерной геометрии (стержень).
7. Вычислить плотность энергии идеального Ферми газа как функцию температуры.
8. Реализовать разложение по сингулярным значениям (SVD) для ленточных матриц. Применить и протестировать для решения задачи линейных наименьших квадратов.

11 Порядок формирования оценок по дисциплине

Преподаватель оценивает работу студентов на семинарских и практических занятиях: оценивается активность студента в дискуссиях, правильность решения задач, уровень ориентированности студента в демонстрируемых им программах, понимание сильных сторон и ограничений используемых вычислительных методов. Оценка по 10-ти балльной шкале за работу на практических занятиях определяется перед промежуточным или итоговым контролем — $O_{\text{ауд}}$.

Преподаватель оценивает самостоятельную работу студентов: оценивается правильность выполнения домашних работ, задания для которых выдаются дистанционно. Оценка по 10-ти балльной шкале за самостоятельную работу определяется перед промежуточным или завершающим контролем — $O_{\text{сам}}$.

Накопленная оценка по дисциплине рассчитывается по формуле:

$$O_{\text{накопл}} = 0.5 * O_{\text{ауд}} + 0.5 * O_{\text{сам}}$$

Способ округления накопленной оценки: в пользу студента.

В диплом выставляется результирующая оценка по учебной дисциплине, которая вычисляется по следующей формуле:

$$O_{результат} = 0.7 * O_{накопл} + 0.3 * O_{экзамен}$$

Способ округления результирующей оценки: арифметический.

12 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

В данном курсе нет разделения на обязательную и дополнительную литературу. Данный список является приблизительным списком рекомендованной литературы.

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. *Численные методы*. М.: Бином, 2002.
2. J. VanderPlas, *A whirlwind tour of Python*, O'Reilly Media, 2015
3. Самарский А.А. *Введение в численные методы*. Учебное пособие для ВУЗов. М.: Наука, 1987.
4. W. H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes: the art of scientific computing (2007)*. Cambridge University Press, 3rd ed. (или любое более старое издание)
5. W. Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations (2006)*. Oxford University Press.
6. N.J. Higham, *The Princeton Companion to Applied Mathematics (2015)*. Princeton University Press.
7. J. VanderPlas, *Python Data Science Handbook*, O'Reilly Media, 2016.

12.1 Справочники, словари, энциклопедии

Абрамович М., Стегун И. *Справочник по специальным функциям*. М.: Наука, 1979.
<http://dlmf.nist.gov> - NIST Digital Library of Mathematical Functions

12.2 Программные средства

Для успешного освоения дисциплины, студент использует следующие программные средства:
Систему Anaconda Python для ОС Windows, Linux или OS X, либо любой другой дистрибутив языка программирования Python, включающий библиотеки SciPy, NumPy, matplotlib, а также компилятор языка Cython.

Jupyter notebook или любую другую IDE по выбору

Microsoft Windows C++ или любой другой компилятор языка C++ по выбору

12.3 Дистанционная поддержка дисциплины

Информационная образовательная среда НИУ ВШЭ.

13 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для успешного освоения дисциплины необходимо следующее материально-техническое обеспечение:

Дисплейный класс, оборудованный современными персональными компьютерами. Интерактивная доска и/или проектор с экраном.