

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского»

**МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ
И ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН:
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ**

**Материалы
VI Всероссийской научно-практической конференции
(Омск, 4 июля 2019 года)**

Научное текстовое электронное издание
сетевого распространения

Омск
Издательство ОмГТУ
2019

УДК 37.016:50+37.016:51
ББК 2р30я43+22.1р30я43
М545

Редакционная коллегия:

И. А. Латыпов, канд. физ.-мат. наук, доцент,
директор Института математики и информационных технологий ОмГУ;

Т. В. Леванова, канд. физ.-мат. наук, доцент,
ст. науч. сотр. Омского филиала Института математики
им. С. Л. Соболева СО РАН, зав. кафедрой прикладной
и вычислительной математики ОмГУ;

А. А. Романова, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры
прикладной и вычислительной математики ОмГУ (отв. редактор)

Методика преподавания математических и естественнонаучных дисциплин: современные проблемы и тенденции развития [Электронный ресурс] : материалы VI Всерос. науч.-практ. конф. (Омск, 4 июля 2019 г.) / М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, ОмГУ ; [редкол.: А. А. Романова (отв. ред.) и др.]. – Электрон. текст. дан. (5,12 Мб). – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2019. – Минимальные системные требования: процессор Intel Pentium 1,3 ГГц и выше; оперативная память 256 Мб и более; свободное место на жестком диске 260 Мб и более; операционная система Microsoft Windows XP/Vista/7/10; разрешение экрана 1024×768 и выше; акустическая система не требуется; дополнительные программные средства Adobe Acrobat Reader 5.0 и выше. – ISBN 978-5-8149-2928-0.

Представлены доклады участников конференции, освещающие проблемы методики преподавания дисциплин математического и естественнонаучного цикла, реализации компетентностного подхода в обучении, самостоятельной работы и научно-исследовательской деятельности обучающихся, а также методические разработки отдельных разделов математики, информатики и естественных наук. Описан опыт использования новых информационных технологий и интерактивных средств обучения.

Сборник предназначен для преподавателей, учителей, аспирантов, научно-педагогических работников.

Ответственность за содержание материалов несут авторы

Издается в авторской редакции

Компьютерная верстка Л. Ю. Бутаковой

ПРИМЕНЕНИЕ GPU-ТЕХНОЛОГИИ ПРИ СОЗДАНИИ РЕАЛИСТИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ В ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ НАУЧНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

А.С. Кочкин

магистрант Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина (г. Бийск)

С.В. Фенский

студент Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина (г. Бийск)

П.В. Захаров

заведующий кафедрой математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, доктор физико-математических наук, доцент (г. Бийск)

Аннотация. В работе рассмотрены возможности применения GPU-технологии при создании иллюстративных материалов и сценариев запуска компьютерных моделей в физике конденсированного состояния для организации научной деятельности студентов. В качестве базового пакета для моделирования рассматривается программный пакет LAMMPS. Приведены рекомендации по настройке и использованию данного программного обеспечения.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, научная деятельность, GPU-технологии, метод молекулярной динамики, LAMMPS.

Современная наука невозможна без компьютерного моделирования. Это связано с рядом причин. В первую очередь, благодаря компьютерным технологиям удастся проверить теоретические гипотезы, которые невозможно реализовать на практике. Далее важным аспектом является экономическая целесообразность проведения компьютерных экспериментов в силу дороговизны натуральных. Также важным является то, что метод компьютерного моделирования достаточно развит и встал в один ряд с натурным экспериментом и теоретическими методами исследования.

Развитие современных компьютерных технологий позволило реализовать самые сложные теоретические модели и приблизиться к объектам реального мира. Однако в рамках учебных дисциплин и научно-исследовательских практик студенты работают с моделями, которые далеки от реальности. В первую очередь это связано с отсутствием возможности реализовать реалистичные модели на учебном оборудовании. Компьютерная техника, которой оснащены учебные классы, не позволяет реализовывать реалистичные модели. В связи с этим встает задача, заключающаяся в обеспечении учебного процесса качественными компьютерными моделями физических процессов, с привлечением минимум затрат на их реализацию. Одной из таких технологий является технология GPU [2, 6], т.е. использование современных видеокарт в процессе моделирования физических явлений.

Компьютерная графика первоначально зародилась, как действенное и мощное средство связи между человеком и вычислительной техникой. Архитектура совре-

менных GPU обусловлена тем, что вычисления, необходимые для моделирования изображения, являются однотипными. За счёт узкой специализации в видеокарте получилось добиться создания устройств с большими вычислительными мощностями и относительно небольшой стоимостью. В настоящее время вычислительная мощность современных GPU (видеокарта) в десятки, сотни раз превышает такие же показатели на CPU (процессор) при примерно равной стоимости видеокарты и процессора (рис.1).

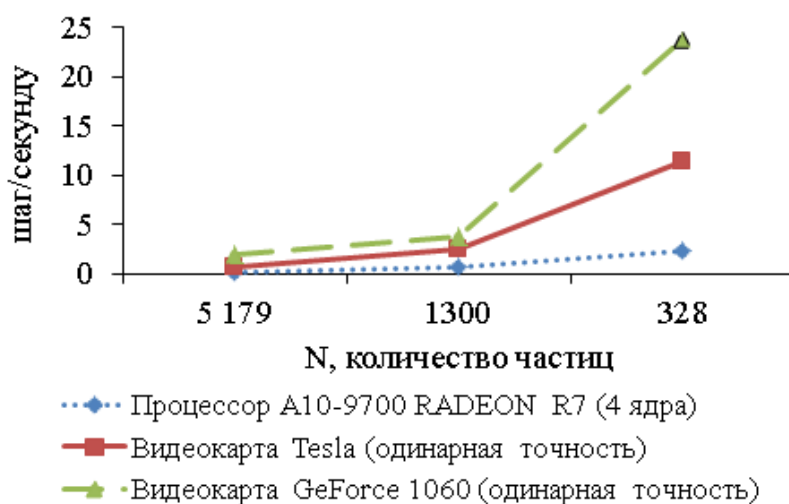


Рис. 1. Сравнение скоростей вычислений на CPU и GPU

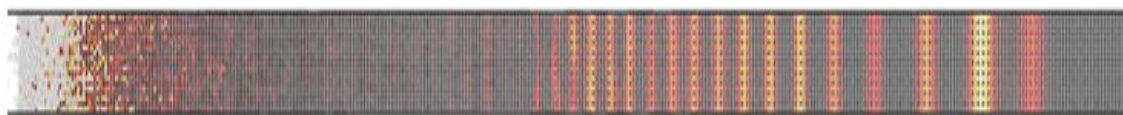


Рис. 2. Фрагмент нановолокна Pt_3Al , содержащего 500000 атомов, и распространение в нём волн солитонного типа

Одной из главных задач моделирования на GPU является создание реалистичных динамических сценариев, что обеспечивает непосредственное восприятие студентом моделируемых процессов в режиме реального времени (рис.2).

В качестве инструмента создания таких наглядных иллюстративных материалов, как на рисунке 2, а также сценариев реализации динамики таких моделей, в данной работе рассматривается программный пакет LAMMPS [7].

LAMMPS был разработан в Sandia National Laboratories. Главными его разработчиками являются Steve Plimpton, Aidan Thompson и Paul Crozier. LAMMPS имеет открытый код и распространяется по лицензии GNU Public License (GPL). LAMMPS работает в операционных системах Windows и Linux. Текущая версия LAMMPS написана на C++, более ранние версии были написаны на F77 и F90.

В расчётах пакет использует различные потенциалы межатомного взаимодействия. При помощи пакета LAMMPS можно создавать все основные типы кристаллических решеток: ОЦК (bcc), ГЦК (fcc), ГП(hex) и др. Есть возможность задавать кристаллографические направления и плоскости в кристаллической решётке. В пакете

LAMMPS содержит большое количество EAM потенциалов различных металлов (золото, железо, никель, платина, медь и т.д.) [1, 6].

Возможно несколько вариантов установки данного программного обеспечения. В первом случае установка происходит для расчётов на процессоре. Второй вариант установки подразумевает использование видео карт и CUDA-технологии. Однако второй вариант возможен только на Linux. В результате инсталляции LAMMPS на Linux под видео карту (GPU) возможно моделировать реалистичные модели в физике, содержащие сотни тысяч и даже миллионы частиц, что невозможно реализовать на одном процессоре.

Принципиально важным является выбор потенциала межатомных взаимодействий. Именно потенциал взаимодействия частиц определяет, насколько реалистичными оказываются модели [3, 5]. Наиболее оптимальным, на наш взгляд, является применение потенциалов, полученных методом погруженного атома (EAM-потенциалы). В отличие от парных потенциалов данные потенциалы позволяют учитывать взаимодействие электронных облаков, путем введения в потенциал функции электронной плотности. Тем самым обеспечивая корректность расчётов вблизи свободных поверхностей, либо при изучении сильно нелинейных процессов в твёрдых телах.

Кроме этого с методической точки зрения важным является процесс визуализации расчётов. Именно визуализация позволяет выявить те или иные особенности рассматриваемых физических процессов. Для демонстрации результатов исследования может быть применено различное дополнительное программное обеспечение, среди которых можно выделить OVITO [8].

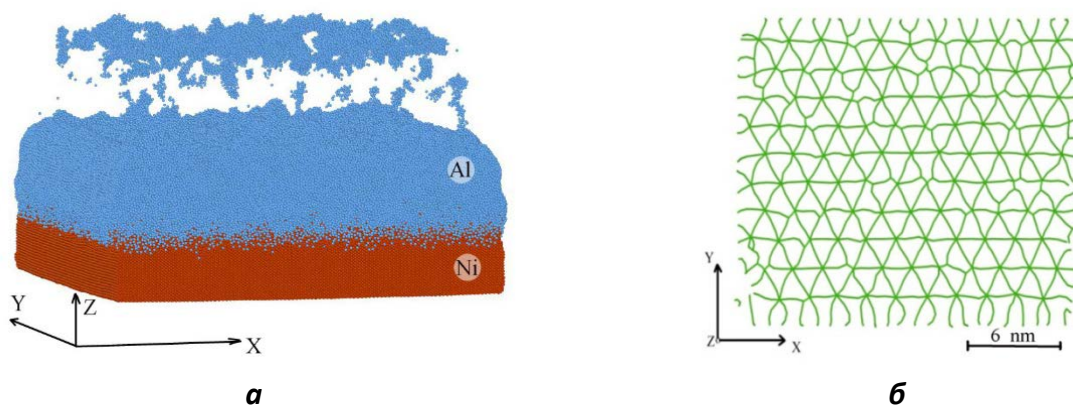


Рис. 3. Пример визуализации (а) модели биметалла при прохождении ударной волны; (б) визуализации сетки дислокаций несоответствия на границе металлов.

В наших работах для визуализации используется OVITO, в виду его простоты и широкого функционала. Пример приведён на рис. 3, иллюстративные материалы взяты из работы [4]. Таким образом, применение высокопроизводительных технологий счёта (GPU и CUDA), не требующих больших финансовых и временных затрат, в совокупности с соответствующими специализированными пакетами, позволяет осуществлять применение реалистичных моделей физических процессов как в учебной деятельности студентов, так и в реализации их исследовательских проектов.

Литература

1. Баимова Ю.А. и др. Дискретные бризеры в графене: влияние температуры // ЖЭТФ. 2016. Т.149. Вып. 5. С. 1005-1010. Baimova J.A. et al. Discrete breathers in crystals // JETP. 2016. V.186 (5).
2. Быков. А.А. Развитие производства биметаллов // Metallurg: научно-технический и производственный журнал. 9, 2009. С. 61–65.
3. Захаров П.В., Еремин А.М., Чередниченко А.И. Основы атомистического моделирования кристаллов в физике конденсированного состояния. – Бийск: АГГПУ им. В.М. Шукшина, 2016. 80 с.
4. Захаров П.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Чередниченко А.И. Моделирование прохождения ударных волн через границу раздела двудольных биметаллических частиц Ni-Al// Letters on material 7 (3), 2017. С. 296–302
5. Санников А.В., Полетаев Г.М., Микрюков В.Р., Старостенков М.Д., Сосков А.А. Атомная структура и диффузионная проницаемость межфазных границ Ni-Al, Cu-Au, Ni- γ Fe // Известия вузов. Черная металлургия. Т. 57, №8. 2014. С. 56–59.
6. Старостенков М.Д. Проблемы моделирования состояния кристаллической решетки металлов и сплавов, содержащих дефекты // Дефекты и физико-механические свойства металлов и сплавов. Барнаул, 1987. 144 с.
7. LAMMPS [Электронный ресурс] // URL: <https://lammps.sandia.gov> (дата обращения: 18.05.2019)
8. OVITO [Электронный ресурс] // URL: <http://ovito.org> (дата обращения: 17.05.2019).