

Инструкция по проведению распределенного расчетного эксперимента

Цели проведения распределенного расчетного эксперимента

Распределенный расчетный эксперимент (далее – Эксперимент) – это коллективное математическое моделирование новых твердотельных материалов, имеющих особо ценные для практических промышленных применений свойства. Целью проведения Эксперимента является поиск химического состава (формулы) и кристаллической структуры нового, не известного ранее материала по заданным целевым свойствам, которыми должен обладать этот материал.

Эксперимент такого типа требует привлечения большого числа участников с их вычислительными мощностями – от 2000 человек до 6000 человек.

В рамках Эксперимента на портале «Проектория» предполагается провести поиск и математическое моделирование структуры и свойств трех новых материалов:

1. Сверхмощный магнитный материал. Отрасли: энергетика, медицина, транспорт, машиностроение, космонавтика, приборостроение. Назначение: изготовление магнитных подвесов и подшипников, деталей компактных электродвигателей, генераторов, высокочастотных трансформаторов, деталей медицинских приборов.
2. Сверхтвердый материал. Отрасли: энергетика, горнорудное дело, машиностроение. Назначение: изготовление ответственных деталей буров и долот, деталей станков для точной механики, механической обработки деталей машин, изготовление ответственных износостойких деталей машин и механизмов.
3. Сверхпрочный и сверхлегкий материал. Отрасли: авиастроение, космонавтика, автомобилестроение, ветроэнергетика. Назначение: изготовление несущих конструкций и ответственных узлов БПЛА, самолетов, колес ветрогенераторов, автомобилей и скоростных поездов.

Участие в Эксперименте позволяет школьникам познакомиться с по-настоящему актуальными задачами современной теоретической и прикладной химии и кристаллографии и принять участие в совершении действительно важного и нового научного открытия. При этом школьники познакомятся с профессиональной действительностью современной химии и наук о материалах, с профессиональным программным обеспечением, примут участие в работе на суперкомпьютере, с которым будут связаны их персональные компьютеры, действительно помогут одной из самых знаменитых научных групп России в решении наукоемких и имеющих огромную практическую ценность и значимость задач.

Правила участия в распределенном расчетном эксперименте

1. Для участия в Эксперименте необходимо быть или делегатом Форума, или входить в список участников Эксперимента, предоставляемый Правительством Ярославской области.

2. Для участия в Эксперименте необходимо зарегистрироваться на портале Проектория.

Порядок регистрации:

- 1) В правом верхнем углу на портале Проектория (<http://proektoria.online>) нажать на ссылку «Зарегистрироваться»;
 - 2) В модуле регистрации необходимо убедиться, что выбрана роль «Школьник» (для школьников и учащихся СПО);
 - 3) Нажать на кнопку Зарегистрироваться;
 - 4) Заполнить все поля формы Регистрации. Поля, отмеченные красной звездочкой (*), являются обязательными для заполнения;
 - 5) При выборе направлений проектных задач можно выбрать одно или несколько направлений. В дальнейшем зарегистрированный пользователь сможет скорректировать направления в Личном кабинете;
 - 6) Если данные введены корректно, пользователь переходит на персональный рабочий стол – страницу выбора проектов, в которых он может принять участие. Регистрация завершена.
3. **24 августа** на портале Проектория необходимо войти под своей учетной записью на портал, через меню первой страницы портала необходимо зайти на страницу «Эксперимент».
 4. На странице «Эксперимент» необходимо внимательно ознакомиться с видеoinструкциями по использованию программного обеспечения, скачать по размещенным на странице ссылкам текстовые инструкции в формате PDF по использованию программного обеспечения и ознакомиться с ними.
 5. На странице «Эксперимент» скачать для установки на личном компьютере программное обеспечение:
 - 5.1. Программу USPEX – обязательно;
 - 5.2. Программу VESTA – желательно, но не обязательно;
 - 5.3. Программу «Расчет твердости» – желательно, но не обязательно;
 6. Провести установку всего скачанного программного обеспечения на личный компьютер, следуя текстовым инструкциям.
 7. Компьютер должен быть подключен к сети Интернет.
 8. В указанное на странице «Эксперимент» время запуска Эксперимента запустить программу USPEX.
 9. Все время проведения Эксперимента не выключать компьютер и не отключаться от сети Интернет. В случае выключения компьютера или отключения его от сети Интернет расчет автоматически отключается, что вредит решению общей задачи, но при повторном включении компьютера и подключении к сети Интернет расчет возобновляется после запуска программы USPEX.
 10. Программа USPEX работает в полностью автоматическом режиме, может работать в фоновом режиме, устанавливает связь с суперкомпьютером Сколтеха

- и МФТИ (группы А.Р. Оганова¹), получает от него расчетные задачи, выполняет их и отправляет пакеты информации на суперкомпьютер.
11. По желанию можно параллельно с работой программы USPEX принять участие в формировании предложений по составу и структуре новых материалов самостоятельно.
 12. Для этого нужно, предварительно ознакомившись с учебными материалами на странице «Эксперимент», следуя инструкции, составить формулы трех новых материалов и нажать на кнопку «Отправить».
 13. Для формирования формулы сверхтвердого материала необходимо, следуя инструкции, открыть программу VESTA, сделать в ней 3D-модель кристаллической структуры предлагаемого сверхтвердого материала и сохранить ее в формате CIF.
 14. Далее необходимо, следуя инструкции, запустить программу «Расчет твердости», загрузить в нее созданный в программе VESTA CIF-файл и посчитать твердость данной кристаллической структуры. Можно выбрать из числа предлагаемых пользователем вариантов структуру с наибольшей твердостью.
 15. Далее необходимо загрузить CIF-файл структуры, которую выбирает пользователь, в поле на странице «Эксперимент», и написать в поле «Твердость» значение твердости этой структуры, полученной по результатам расчета в программе «Расчет твердости».
 16. Для формирования формул Сверхмощного магнитного материала и Сверхпрочного и сверхлегкого материала участник также должен сформировать в программе VESTA CIF-файлы кристаллической структуры и загрузить их в соответствующие поля на странице «Эксперимент».
 17. Каждый участник эксперимента может предложить не более 10 (десяти) формул каждого из материалов.
 18. Авторы лучших материалов (по одному автору на материал – магнитный, сверхпрочный, сверхтвердый), наиболее соответствующего результатам работы программы USPEX, получит ценный приз.
 19. Результаты Эксперимента будут вывешиваться на странице «Эксперимент» с ежедневным обновлением.
 20. Итоги Эксперимента будут подведены 1 сентября на Форуме, будет вестись онлайн-трансляция на портале Проектория.

¹ См. справку об А.Р. Оганове в Приложении.

Артём Ромаевич Оганов (род. 3 марта 1975 года) — теоретик-кристаллограф, минералог, химик, физик, материаловед. Наиболее известен работами по созданию методов компьютерного дизайна новых материалов и предсказания кристаллических структур. Популяризатор науки.

С 2008 года является профессором и заведующим лабораторией компьютерного дизайна материалов в Университете штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук. В 2013 году, помимо лаборатории в США, создал и возглавил лаборатории в России (в Московском физико-техническом институте) и в Китае. С 2015 г. является профессором Сколковского института науки и технологий. В 2015 г. избран профессором Российской академии наук.

Оганов — автор более 190 научных статей и глав в книгах (многие вышли в Nature, Science и других журналах) и 5 патентов. Полная цитируемость — более 11100, индекс Хирша 55 (по данным на май 2017 г.)^[9].

Лауреат нескольких научных премий, включая премию Лациса Швейцарской высшей технической школы Цюриха, медаль Европейского минералогического союза, три премии издательства Elsevier за самые цитируемые работы. С 2005 года был приглашённым профессором в Италии (Милан), Франции (Париж, Лилль и Пуатье), Китае (Гулин, Пекин, Гонконг). Про Оганова были сняты фильмы «Цвет кристалла» (2012, реж. Владимир Герчиков) и «Made by Russians» (2015, реж. Леонид Парфёнов). В 2012 году Оганов стал почётным профессором Яньшанского университета, а в 2013 г. — почётным членом Американского минералогического общества. С 2012 года возглавляет Комиссию по кристаллографии материалов при Международном союзе кристаллографов. В 2013—2014 являлся президентом Российско-американской ассоциации учёных (RASA-USA). В 2014 году журналы «Русский репортёр» и «Эксперт» включили Оганова в список 100 наиболее влиятельных россиян, а журнал «Forbes» включил его в число «50 россиян, завоевавших мир». В 2016 г. компания Thomson Reuters присудила Оганову премию Russian Highly Cited Researcher Award за высокоцитируемые работы.

Наиболее значительные работы — в области теоретического дизайна новых материалов, изучения состояния вещества при высоких давлениях (в частности, в недрах Земли и планет), разработки методов предсказания структуры и свойств вещества. Разработанный Огановым эффективный эволюционный метод предсказания кристаллических структур был положен им в основу программы USPEX, которую используют более 3800 исследователей по всему миру. Предсказанные им сверхтвёрдая структура бора, прозрачная фаза натрия, новый аллотроп углерода, стабильные соединения гелия и натрия, стабильность $MgSiO_3$ пост-перовскита в мантии Земли, и предсказание «запрещённых» соединений (таких, как Na_3Cl , не вписывающихся в традиционные представления химии) были впоследствии подтверждены экспериментом и существенно повлияли на фундаментальные знания в материаловедении, физике, химии и науках о Земле. Недавнее открытие борофена открывает большие технологические перспективы. Разработанные Огановым теоретические методы позволяют предсказывать и получать материалы с заданными свойствами.