



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФИЛИАЛ

ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ИНСТИТУТ СИСТЕМНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

Межведомственный суперкомпьютерный центр Российской академии наук
(МСЦ РАН – филиал ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН)

УТВЕРЖДАЮ

Директор МСЦ РАН –

руководитель ЦКП

вычислительными ресурсами

МСЦ РАН – филиала ФГУ ФНЦ

НИИСИ РАН


Б.М. Шабанов

«26» 12 2019 г.

Руководящая документация

**«Описание программного обеспечения,
установленного на системах ЦКП»**

**(ПО установлено в рамках выполнения работ по проекту «Поддержка и
развитие Центра коллективного пользования вычислительными
ресурсами МСЦ РАН – филиала ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН»)**

Руководящая документация рассмотрена и одобрена на заседании Ученого
совета МСЦ РАН – секции Ученого совета ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН

«25» 12 2019 г., протокол № 6

Москва 2019

Введение

Список установленного программного обеспечения расширен следующими программными пакетами общего назначения:

- **R** – язык для статистической обработки данных;
- **Erlang** – функциональный язык, предназначенный для создания распределенных масштабируемых отказоустойчивых систем;
- **Python 3** – язык программирования широкого применения) с библиотеками:
 - **NumPy** – эффективная реализация работы с многомерными массивами;
 - **SciPy** – набор прикладных математических процедур для обработки данных;
 - **Pandas** – реализация работы с табличными данными;
 - **Matplotlib** – 2D и 3D визуализация.

Также были установлены расчетные пакеты специального назначения:

- **Quantum ESPRESSO** – инструмент для энергетических расчетов многоэлектронных систем;
- **SIESTA** – программный пакет для выполнения расчетов электронной структуры молекул и твердых тел и решения задач молекулярной динамики;
- **Dalton** – пакет для проведения продвинутых квантово-химических расчетов на основе молекулярной электронной структуры.

На системах Центра было опробовано программное обеспечения пакета инженерного анализа ЛОГОС (АЭРО-ГИДРО, ТЕПЛО, ПРОЧНОСТЬ, ПРЕПОСТ). Пользователи могут получить доступ к данному программному обеспечению при предоставлении соответствующих лицензий.

Ниже приведена краткая информация о каждом установленном пакете, включая его сжатое описание, ссылки на полезную литературу, контакты для получения дополнительных консультаций по продукту.

R

R – язык программирования для статистической обработки данных, а также программная среда вычислений с открытым программным кодом. R поддерживает широкий спектр статистических и численных методов и обладает хорошей расширяемостью с помощью пакетов. Язык прекрасно подходит для обработки данных суперкомпьютерных расчетов, генерации текстовых и визуальных отчетных материалов.

В числе особенностей языка, позволивших ему завоевать доверие среди ученых, исследователей и аналитиков во всем мире можно перечислить следующие:

- эффективная обработка данных и простые средства для сохранения результатов;
- набор операторов для обработки массивов, матриц и других сложных конструкций;
- большая, последовательная, интегрированная коллекция инструментальных средств для проведения статистического анализа;
- многочисленные графические средства;
- простой и эффективный язык программирования, который включает много возможностей.

Примеры использования:

```
-sh-4.2$ R
> M <- cbind(c(1, 0, 1), c(0, 1, 2), c(0, 0, 1))
> solve(M)
      [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    0    0
[2,]    0    1    0
[3,]   -1   -2    1
> (M <- matrix(c(1, 2, 3, 5), ncol=2))
      [,1] [,2]
[1,]    1    3
[2,]    2    5
> det(M)
[1] -1
> (M <- matrix(1:9, ncol=3))
      [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    4    7
[2,]    2    5    8
[3,]    3    6    9
> eigen(M)
eigen() decomposition
$values
[1] 1.611684e+01 -1.116844e+00 -5.700691e-16

$vectors
      [,1]      [,2]      [,3]
[1,] -0.4645473 -0.8829060  0.4082483
[2,] -0.5707955 -0.2395204 -0.8164966
[3,] -0.6770438  0.4038651  0.4082483
```

Книги:

- Adler J. *R in a Nutshell. A Desktop Quick Reference.* // O'Reilly, 2012.
- Abedin J. *Data Manipulation with R. Perform group-wise data manipulation and deal with large datasets using R efficiently and effectively.* // Packt Publishing, 2014.
- Zhao Y. *R and Data Mining. Examples and Case Studies.* // Elsevier, 2013.
- Scutari M., Denis J.-B. *Bayesian Networks. With Examples in R.* // CRC Press, 2015.
- Cotton R. *Testing R Code.* // CRC Press, 2017.

Сетевые ресурсы:

- *The R Project for Statistical Computing.* <https://www.r-project.org>
- *R FAQ. Frequently Asked Questions on R.* <https://cran.r-project.org/doc/FAQ/R-FAQ.html>
- *Data Visualization with R.* <https://rkabacoff.github.io/datavis>
- *Static and dynamic network visualization with R.* <https://kateto.net/network-visualization>
- *R-bloggers.* <https://www.r-bloggers.com>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru

Erlang

Erlang – функциональный язык программирования с сильной динамической типизацией, предназначенный для создания распределенных масштабируемых отказоустойчивых систем и управления потоками данных. Обладает рядом особенностей, которые позволяют в короткие сроки создавать надежные функциональные приложения. Язык не предназначен для использования в высокопроизводительных вычислениях, однако прекрасно подходит для быстрой распределенной обработки данных, обработки потоков и создания параллельных приложений. Среди основных особенностей можно перечислить следующие:

- функциональная природа и отсутствие изменяемого состояния, что означает запрет изменения объектов программы (за исключением специальных таблиц);
- гибкий механизм pattern-matching-a, который позволяет компактно представлять сложные условия и проверку соответствия для объектов произвольных типов и структуры;
- удобная система встроенных типов данных (включая атомы, кортежи, битовые строки и бинарные данные, списки, функциональные объекты, ассоциативные массивы), поддержанных на уровне синтаксиса, удобный функционал для работы с этими типами;
- возможность создания анонимных функций и создания функций с использованием замыканий, возможность использования функций как данных, функции высшего порядка, динамическое создание функций;
- мощный механизм обработки потоков данных с помощью проверки соответствия шаблону;
- реализация легковесных процессов, позволяющая создавать сотни тысяч процессов на одном вычислителе, и обеспечение эффективной работы с ними;
- удобная система межпроцессной коммуникации с помощью сообщений, невозможность возникновения конфликтов при параллельной работе процессов;
- уникальная платформа OTP (Open Telecom Platform), позволяющая оперировать такими сущностями, как сервера, супервизоры, приложения и другие, с помощью которых как из строительных кирпичиков можно собирать надежные отказоустойчивые масштабируемые системы.

Примеры использования:

```
-sh-4.2$ erl
Eshell V5.10.4 (abort with ^G)
1> A = lists:seq(1, 10, 1).
[1,2,3,4,5,6,7,8,9,10]
2> A2 = lists:map(fun(X) -> X * X + 1 end, A).
[2,5,10,17,26,37,50,65,82,101]
3> A3 = [X div 5 + 1 || X <- A2, X > 60].
[14,17,21]
4> A4 = lists:zip(A, A3 ++ lists:duplicate(7, 2)).
[{1,14},{2,17},
 {3,21},
 {4,2},
 {5,2},
 {6,2},
 {7,2},
 {8,2},
 {9,2},
 {10,2}]
5> lists:foldl(fun({X, Y}, Acc) -> Acc + X * Y end, 0, A4).
209
```

Книги:

- Armstrong J. *Programming Erlang. Software for a Concurrent World.* // 2nd edition, Pragmatic Programmers, 2013.
- Armdtrong J. *Programming Erlang. Software for a Concurrent World.* // Pragmatic Programmers, 2007.
- Hebert F. *Learn You Some Erlang for Great Good! A Beginner' Guide.* // No Star Press, 2013.
- Cesarini F., Thompson S. *Erlang Programming. A Concurrent Approach to Software Development.* // O'Reilly, 2009.
- Laurent S. St. *Introducing Erlang. Getting Started in Functional Programming.* // O'Reilly, 2017.
- Sher G. I. *Handbook of Neuroevolution Through Erlang.* // Springer, 2013.

Сетевые ресурсы:

- *Erlang Programming Language.* <https://www.erlang.org>
- *Github repository erlang/otp.* <https://github.com/erlang/otp/releases>
- *Learn You Some Erlang for Great Good!* <https://learnyousomeerlang.com/content>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscs.ru

Python 3

Python3 – высокоуровневый язык программирования общего назначения, с помощью которого можно создавать высокопроизводительный и понятный код. Стандартная библиотека языка включает в себя большой объем полезного функционала. Python 3 поддерживает структурное, объектно-ориентированное, функциональное, императивное и аспектно-ориентированное программирование. Основные архитектурные черты – динамическая типизация, автоматическое управление памятью, полная интроспекция, механизм обработки исключений, поддержка многопоточных вычислений, высокоуровневые структуры данных. Поддерживается разбиение программ на модули, которые, в свою очередь, могут объединяться в пакеты.

Язык поддерживает основные понятия объектно-ориентированного программирования (классы; наследование, в том числе множественное; полиморфизм (все функции виртуальные); инкапсуляция; конструкторы, деструкторы, распределители памяти; перегрузка операторов; свойства (имитация поля с помощью функций); управление доступом к полям; метапрограммирование (управление созданием классов, триггеры на создание классов, и др.); полная интроспекция; классовые и статические методы, классовые поля; классы, вложенные в функции и классы), а также функционального программирования (функция является объектом; функции высших порядков; рекурсия; развитая обработка списков; аналог замыканий; частичное применение функции; возможность реализации других средств на самом языке, например, карринг).

Примеры синтаксиса:

```
def flatten(a):
    """ Flatten list. """
    if a == []:
        return []
    if not isinstance(a, list):
        return [a]
    return reduce(lambda x, y: x + flatten(y), a, [])

def chop(s, size = 1):
    """ Chop list or string. """
    c = s
    r = []
    if size > 0:
        while len(c) > size:
            r.append(c[:size])
            c = c[size:]
        if c != []:
            r.append(c)
    elif size < 0:
        while len(c) > -size:
            r.insert(0, c[size:])
            c = c[:size]
        if c != []:
            r.insert(0, c)
    else:
        raise ValueError("Zero chop size.")
    return r
```

Книги:

- Плас Дж. В. *Python для сложных задач. Наука о данных и машинное обучение.* // O'Reilly, 2018.
- Horstman C., Necaise R. D. *Python for Everyone.* // Wiley, 2014.
- Necaise R. D. *Data Structures and Algorithms Using Python.* // Wiley, 2011.
- Lenaro G. *Python High Performance Programming.* // Packt Publishing, 2013.
- Lutz M. *Python Pocket Reference. Python in Your Pocket.* // O'Reilly, 2014.
- Mertz D. *Functional Programming in Python.* // O'Reilly, 2015.
- Shaw Z. *Learn Python the Hard Way.* // Addison-Wesley, 2014.

Сетевые ресурсы:

- *The official home of the Python Programming Language.* <https://www.python.org>
- *Погружение в Python 3.* <https://pep8.ru/doc/dive-into-python-3>
- *Free Interactive Python Tutorial.* <https://www.learnpython.org>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru

NumPy

NumPy – библиотека с открытым программным кодом для языка программирования Python. Предназначена для эффективной поддержки многомерных массивов, включает в себя реализацию множества высокоуровневых функций для работы с многомерными массивами.

Примеры использования:

```
-sh-4.2$ python3
>>> import numpy as np
>>> X, Y = np.meshgrid(np.linspace(-1,1,10), np.linspace(-1,1,10))
>>> D = np.hypot(X, Y)
>>> sigma, mu = 1.0, 0.0
>>> G = np.exp(-(D - mu) ** 2 / (2.0 * sigma ** 2))
>>> print(G)
[[ 0.36787944  0.44822088  0.51979489  0.57375342  0.60279818  0.60279818
  0.57375342  0.51979489  0.44822088  0.36787944]
 [ 0.44822088  0.54610814  0.63331324  0.69905581  0.73444367  0.73444367
  0.69905581  0.63331324  0.54610814  0.44822088]
 [ 0.51979489  0.63331324  0.73444367  0.81068432  0.85172308  0.85172308
  0.81068432  0.73444367  0.63331324  0.51979489]
 [ 0.57375342  0.69905581  0.81068432  0.89483932  0.9401382  0.9401382
  0.89483932  0.81068432  0.69905581  0.57375342]
 [ 0.60279818  0.73444367  0.85172308  0.9401382  0.98773022  0.98773022
  0.9401382  0.85172308  0.73444367  0.60279818]
 [ 0.60279818  0.73444367  0.85172308  0.9401382  0.98773022  0.98773022
  0.9401382  0.85172308  0.73444367  0.60279818]
 [ 0.57375342  0.69905581  0.81068432  0.89483932  0.9401382  0.9401382
  0.89483932  0.81068432  0.69905581  0.57375342]
 [ 0.51979489  0.63331324  0.73444367  0.81068432  0.85172308  0.85172308
  0.81068432  0.73444367  0.63331324  0.51979489]
 [ 0.44822088  0.54610814  0.63331324  0.69905581  0.73444367  0.73444367
  0.69905581  0.63331324  0.54610814  0.44822088]
 [ 0.36787944  0.44822088  0.51979489  0.57375342  0.60279818  0.60279818
  0.57375342  0.51979489  0.44822088  0.36787944]]
>>> def moving_average(a, n=3):
...     ret = np.cumsum(a, dtype=float)
...     ret[n:] = ret[n:] - ret[:-n]
...     return ret[n - 1:] / n
...
>>> print(moving_average(np.arange(20), 3))
[ 1.  2.  3.  4.  5.  6.  7.  8.  9. 10. 11. 12. 13. 14.
 15. 16. 17. 18.]
```

Книги:

- Oliphant T. E. *Guide to NumPy*. // CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015.
- McKinney W. *Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython*. // O'Reilly, 2017.
- Johansson R. *Numerical Python: Scientific Computing and Data Science Applications with NumPy, SciPy and Matplotlib*. // Apress, 2018.
- VanderPlas J. *Python Data Science Handbook: Essential Tools for Working with Data*. // O'Reilly, 2016.
- Cakmak U. M., Cuhadaroglu M. *Mastering Numerical Computing with NumPy: Master scientific computing and perform complex operations with ease*. // Packt Publishing, 2018.

Сетевые ресурсы:

- *NumPy*. <https://numpy.org>
- *NumPy / Python 3 для начинающих*. <https://pythonworld.ru/numpy>
- *NumPy в Python*. <https://habr.com/ru/post/352678>
- *Нескучный туториал по NumPy*. <https://habr.com/ru/post/469355>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru

SciPy

SciPy – пакет прикладных математических процедур, основанный на расширении NumPy Python. Предназначен для обработки данных. Функционал пакета позволяет проводить действия по обработке данных, аналогичные таким пакетам, как MATLAB, IDL, Octave, R-Lab, SciLab.

В пакет включена реализация таких процедур как: условная и безусловная минимизация скалярных функций нескольких переменных (minim) с помощью различных алгоритмов (симплекс Нелдера-Мида, BFGS, сопряженных градиентов Ньютона, COBYLA и SLSQP); глобальной оптимизация (например: basinhopping, diff_evolution); минимизация остатков МНК (least_squares) и алгоритмы подгонки кривых нелинейным МНК (curve_fit); минимизации скалярной функций одной переменной (minim_scalar) и поиска корней (root_scalar); многомерные решатели системы уравнений (root) с использованием различных алгоритмов (гибридный Пауэлла, Левенберг-Марквардт или крупномасштабные методы, такие как Ньютона-Крылова).

Примеры использования:

```
-sh-4.2$ python3
>>> import numpy as np
>>>
>>> def rosen(x):
...     """The Rosenbrock function"""
...     return np.sum(100.0*(x[1:]-x[:-1])**2.0)**2.0 + (1-x[:-1])**2.0, axis=0)
...
>>> from scipy.optimize import minimize
res = minimize(rosen, x0, method='nelder-mead',
               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
print(res.x)>>> x0 = np.array([1.3, 0.7, 0.8, 1.9, 1.2])
>>> res = minimize(rosen, x0, method='nelder-mead',
...               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
Optimization terminated successfully.
      Current function value: 0.000000
      Iterations: 339
      Function evaluations: 571
>>> print(res.x)
[ 1.  1.  1.  1.  1.]
>>>
>>> x0 = np.array([1.3, 0.7, 0.8, 1.9, 1.2])
>>> res = minimize(rosen, x0, method='powell',
...               options={'xtol': 1e-8, 'disp': True})
print(res.x)
Optimization terminated successfully.
      Current function value: 0.000000
      Iterations: 19
      Function evaluations: 1622
>>> print(res.x)
[ 1.  1.  1.  1.  1.]
```

Книги:

- Nunes-Iglesias J., van der Walt S., Dashnow H. *Elegant SciPy: The Art of Scientific Python*. // O'Reilly, 2017.
- Johansson R. *Numerical Python: Scientific Computing and Data Science Applications with NumPy, SciPy and Matplotlib*. // Apress, 2018.
- Rojas G. S. J., Christensen E. A., Blanco-Silva F. J. *Learning SciPy for Numerical and Scientific Computing*. // Packt Publishing, 2015.
- Martins L. F., Ramos R. O., Ayyadevara V. K. *SciPy Recipes: A cookbook with over 110 proven recipes for performing mathematical and scientific computations*. // Packt Publishing, 2017.
- Blanco-Silva F. J. *Mastering SciPy*. // Packs Publishing, 2015.

Сетевые ресурсы:

- SciPy. <https://www.scipy.org>
- SciPy Wiki. <https://en.wikipedia.org/wiki/SciPy>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscs.ru

Pandas

Pandas – пакет для языка программирования Python, который предназначен для работы с табличными данными. Пакет дает возможность строить сводные таблицы, выполнять группировки, предоставляет удобный доступ к данным, взаимодействует с пакетом matplotlib и дает возможность с помощью него отображать данные на графиках.

Основными типами данных Pandas являются Series – проиндексированный одномерный массив значений, DataFrame – проиндексированный многомерный массив значений, каждый столбец которого является элементом типа Series. Пакет позволяет работать с множеством типов источников данных, таких как SQL, текстовые данные, Excel файлы, HTML.

Примеры использования:

```
>>> import pandas as pd
>>>
>>> df = pd.DataFrame({
...     'country': ['Kazakhstan', 'Russia', 'Belarus', 'Ukraine'],
...     'population': [17.04, 143.5, 9.5, 45.5],
...     'square': [2724902, 17125191, 207600, 603628]
... }, index=['KZ', 'RU', 'BY', 'UA'])
>>> df
      country  population  square
KZ  Kazakhstan    17.04  2724902
RU    Russia    143.50  17125191
BY    Belarus     9.50   207600
UA    Ukraine    45.50   603628
>>> df.index = ['KZ', 'RU', 'BY', 'UA']
>>> df.index.name = 'Country Code'
>>> df
      country  population  square
Country Code
KZ    Kazakhstan    17.04  2724902
RU      Russia    143.50  17125191
BY    Belarus     9.50   207600
UA    Ukraine    45.50   603628
>>>
>>> titanic_df = pd.read_csv('titanic.csv')
>>> print(titanic_df.head())
  PassengerID      Name  PClass  Age  \
0           1  Allen, Miss Elisabeth Walton  1st  29.00
1           2  Allison, Miss Helen Loraine  1st   2.00
2           3  Allison, Mr Hudson Joshua Creighton  1st  30.00
3           4  Allison, Mrs Hudson JC (Bessie Waldo Daniels)  1st  25.00
Sex  Survived  SexCode
0  female      1      1
1  female      0      1
2   male      0      0
3  female      0      1
```

Книги:

- Chen D. Y. *Pandas for Everyone: Python Data Analysis*. // Addison-Wesley, 2018.
- McKinney W. *Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython*. // O'Reilly, 2017.
- Molin S. *Hands-On Data Analysis with Pandas: Efficiently perform data collections, wrangling, analysis, and visualization using Python*. // Packt Publishing, 2019.
- Petrou T. *Pandas Cookbook: Recipes for Scientific Computing, Time Series Analysis and Data Visualization using Python*. // Packt Publishing, 2017.
- Klosterman S. *Data Science Projects with Pandas: A case study approach to successful data science projects using Python, pandas, and scikit-learn*. // Packt Publishing, 2019.

Сетевые ресурсы:

- *Python Data Analysis Library – pandas*. <https://pandas.pydata.org>
- *pandas Wiki*. [https://en.wikipedia.org/wiki/Pandas_\(software\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Pandas_(software))
- *Top 8 pandas resources*. <https://www.dataschool.io/best-python-pandas-resources>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru

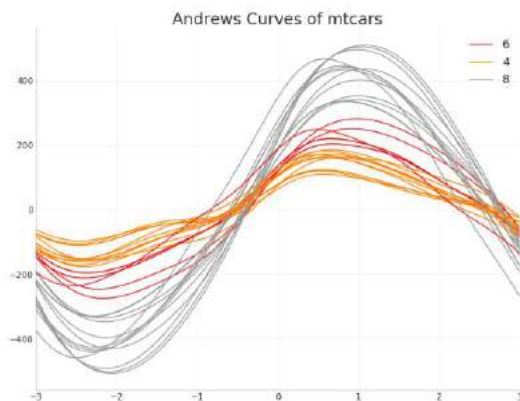
Matplotlib

Matplotlib – библиотека а языке программирования Python для визуализации двумерной (2D) и трехмерной (3D) графики. Поддерживает многие средства отображения данных, в том числе графики, диаграммы разброса, столбчатые диаграммы, гистограммы, круговые диаграммы, ствол-лист диаграммы, контурные графики, поля градиентов, спектральные диаграммы.

Примеры использования:

```
from pandas.plotting import andrews_curves

# Import
df = pd.read_csv("https://github.com/selva86/
                 datasets/raw/master/mtcars.csv")
df.drop(['cars', 'carname'], axis=1, inplace=True)
# Plot
plt.figure(figsize=(12,9), dpi= 80)
andrews_curves(df, 'cyl', colormap='Set1')
# Lighten borders
plt.gca().spines["top"].set_alpha(0)
plt.gca().spines["bottom"].set_alpha(.3)
plt.gca().spines["right"].set_alpha(0)
plt.gca().spines["left"].set_alpha(.3)
plt.title('Andrews Curves of mtcars', fontsize=22)
plt.xlim(-3,3)
plt.grid(alpha=0.3)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.show()
```



Книги:

- Poladi S. R. *Matplotlib 3.0 Cookbook: Over 150 recipes to create highly detailed interactive vis using Python.* // Packt Publ., 2018.
- Nelli F. *Python Data Alanytics: With Pandas, NumPy, and Matplotlib.* // Apress, 2018.
- Dobler M., Grossman T. *Data Visualization with Python: Create an impact with meaningful data insights using interactive and engaging visuals.* // Packt Publishing, 2019.
- Root B. *Interactive Applications using Matplotlib.* // Packt Publishing, 2015.
- McGregor D. *Mastering matplotlib.* // Packt Publishing, 2015.
- Johansson R. *Numerical Python: Scientific Computing and Data Science Applications with Numpy, SciPy and Matplotlib.* // Apress, 2018.

Сетевые ресурсы:

- [matplotlib](https://matplotlib.org).
- *Построение графиков в Python при помощи Matplotlib.* <https://python-scripts.com/matplotlib>
- *50 оттенков matplotlib.* <https://habr.com/ru/post/468295>
- *Краткое руководство по Matplotlib.* https://pyprog.pro/mpl/mpl_short_guide.html

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jssc.ru

Quantum ESPRESSO

Quantum ESPRESSO – (PWscf, Plane-Wave self-consistent field) – программный пакет, построенный на базе теории функционала электронной плотности (DFT) и методе псевдопотенциала (PAW-метод). Представляет собой мощный инструмент для энергетических расчетов многоэлектронных систем и предназначен для моделирования на квантово-механическом уровне малых кластеров с числом атомов 10-100, определяющих существование возможных в материале фаз. Во многом является аналогом коммерческого квантово-химического ППП VASP. Описание моделируемого объекта строится на языке волновых функций и заданного гамильтониана системы. Целевыми функциями являются электронный энергетический спектр, собственные функции и плотность состояний изолированного кластера при фиксированном положении ядер, потенциальная энергия системы с учетом электронно-ядерных подсистем. С помощью ППП PWscf можно прогнозировать плотности электронных состояний произвольных кристаллических материалов и их свойств, исходя из основ квантовой теории строения вещества. Расчеты с применением ППП PWscf оптимизированы для использования сотен процессоров, поэтому большой интерес вызывает возможность использования этих пакетов на большом числе процессоров в грид-системах (на основе MPI). ППП PWscf распространяется в исходных текстах по лицензии GNU GPL, что позволяет свободно использовать его в качестве грид-сервиса.

Пакет Quantum ESPRESSO предназначен для работы в операционной системе Linux. Расчеты проводятся в базисе плоских волн с использованием сепарабельных сохраняющих норму (Гаманн-Шлютер-Чинг, Труллер-Мартинс и др. типов) или ультрамягких псевдопотенциалов, а также метода PAW. Предусмотрена возможность использования обменно-корреляционных функционалов различного вида: от приближения локальной плотности (LDA), до обобщенно-градиентного приближения (GGA) в работах разных авторов. Для работы с Quantum ESPRESSO существует обширная библиотека псевдопотенциалов различных атомов. Кроме того, псевдопотенциалы с необходимыми параметрами могут быть получены с использованием входящей в состав пакета программы `ld1`. Можно выделить следующие ключевые возможности программного пакета Quantum ESPRESSO:

- решение уравнений Кона-Шема и определение полной энергии многоэлектронных систем;
- расчет распределения электронной плотности;
- вычисление полной и парциальных плотностей состояний;
- расчет атомных зарядов по схеме Левдина;
- расчет межатомных сил, тензора напряжений и структурная оптимизация;
- исследование эволюции многоатомных систем методом молекулярной динамики;
- определение энергетических барьеров и путей реакций;
- расчет эффективных зарядов Борна и диэлектрической проницаемости;
- расчет фононных частот и векторов поляризации в рамках теории возмущения для функционала плотности (DFPT);
- вычисление силовых постоянных кристалла;
- расчет коэффициентов электрон-фононного взаимодействия для металлов.



Рисунок 1. В качестве визуализатора Quantum ESPRESSO может быть использована программа XCrySDen.

Место установки программы:

`/opt/lib/qe-6.5/`

Книги:

- Lee J. G. *Computational Materials Science: An Introduction*. // CRC Press, 2016.
- Rapaport D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. // Cambridge University Press, 2004.
- Leimkuhler B., Matthews C. *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. // Springer, 2015.
- Marx D., Hutter J. *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*. // Cambridge Un. Press, 2009.
- Sholl D., Steckel J. A. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. // Wiley-Interscience, 2009.

Сетевые ресурсы:

- *Quantum ESPRESSO*. <https://www.quantum-espresso.org>
- *Quantum Espresso Users*. <https://www.facebook.com/quantum.espresso.users>
- *Quantum ESPRESSO Summer School 2019*. <http://qe2019.ijs.si>
- *Quantum ESPRESSO*. <https://twitter.com/QuantumESPRESSO>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscc.ru

SIESTA

SIESTA – (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) – программный пакет для выполнения расчетов электронной структуры молекул и твердых тел и решения задач молекулярной динамики.

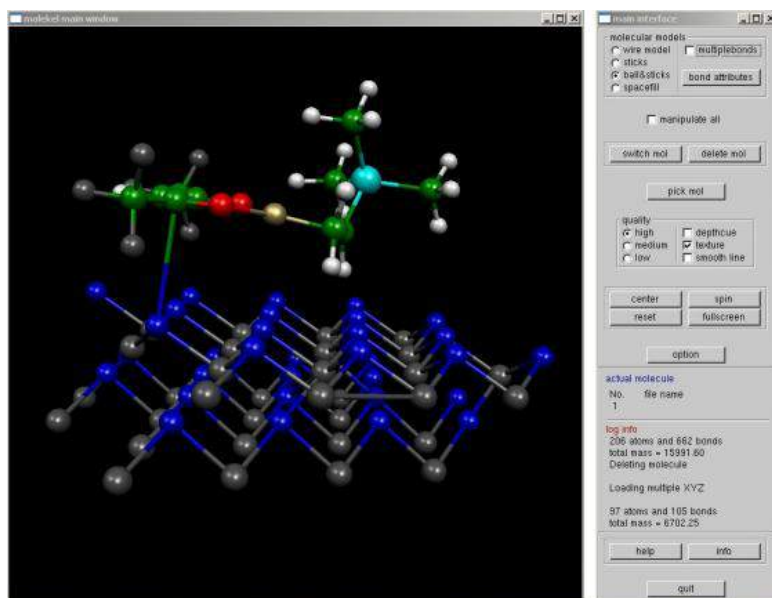


Рисунок 1. Пример визуализации результатов расчетов программного пакета SIESTA (иллюстрация взята из презентации https://personales.unican.es/junquera/javierjunquera_files/Methodos/MD/Verlet.pdf).

Место установки программы:
/opt/lib/siesta-4.1-b4/

Книги и статьи:

- Юрьев А. А., Гельчинский Б. Р., Ватолин Н. А. *Первопринципное молекулярно-динамическое моделирование особенностей температурной зависимости некоторых свойств жидкого висмута.* // Доклады Академии Наук, 2018, т. 479, № 1.
- Созыкин С. А., Бескачко В. П., Вяткин Г. П. *Выбор оптимальных параметров для моделирования атомной и электронной структуры углеродных нанотрубок в пакете SIESTA.* // Вестник ЮУрГУ, 2015, т. 7, № 3.
- Soler J. M., Artacho E., Gale J. D. et al. *The Siesta method for ab initio order-N materials simulation.* // Journal of Physics, 2002, vol. 14.

Сетевые ресурсы:

- SIESTA. <https://departments.icmab.es/leem/siesta>
- SIESTA github. <https://github.com/mf0hka/siesta>
- SIESTA pre- and post-processing tools. <http://www.home.uni-osnabrueck.de/apostnik/download.html>
- Basic introduction to SIESTA. <http://www.psi-k.org/Psik-training/Bristol-September%202009/Emilio/ArtachoBristolSiestaTut09-2.pdf>
- *Molecular dynamics in the microcanonical (NVE) ensemble: the Verlet algorithm.* https://personales.unican.es/junquera/javierjunquera_files/Methodos/MD/Verlet.pdf
- *Molecular dynamics in Siesta.* <https://departments.icmab.es/leem/siesta/zcam14/Talks/MVFdezSerra-MD.pdf>

Консультация по вопросам использования:
vtasks@jsgcc.ru

Dalton

Dalton – это программная система общего назначения для продвинутых квантово-химических расчетов на основе молекулярной электронной структуры, распространяемая по лицензионному соглашению без каких-либо затрат для пользователя. С помощью Dalton молекулярные системы могут быть проанализированы с использованием различных методов электронной структуры, включая методы самосогласованного поля (SCF, self consistent field) Хартри-Фока (HF, Hartree-Fock) и Кон-Шама (KS, Kohn-Sham) для широкого применения, многоконфигурационный SCF (MCSCF, multiconfigurational SCF) метод высокой гибкости и различные методы связанных кластеров (CC, coupled cluster) для высокой точности. На всех этих уровнях можно рассчитать множество молекулярных свойств, что позволяет пользователю программы изучать, например, молекулярную структуру, энергетику, реакционную способность, спектроскопические параметры, линейные и нелинейные оптические процессы. Небольшие системы могут быть точно сопоставлены с использованием методов полного взаимодействия конфигурации (FCI, full configuration interaction). Экологические эффекты могут быть включены на разных уровнях модели. Для некоторых моделей электронной структуры большие молекулы могут быть изучены с использованием линейного масштабирования и массивно-параллельных алгоритмов. В качестве встроенного визуализатора Dalton поддерживает VRML (Virtual Reality Modeling Language).

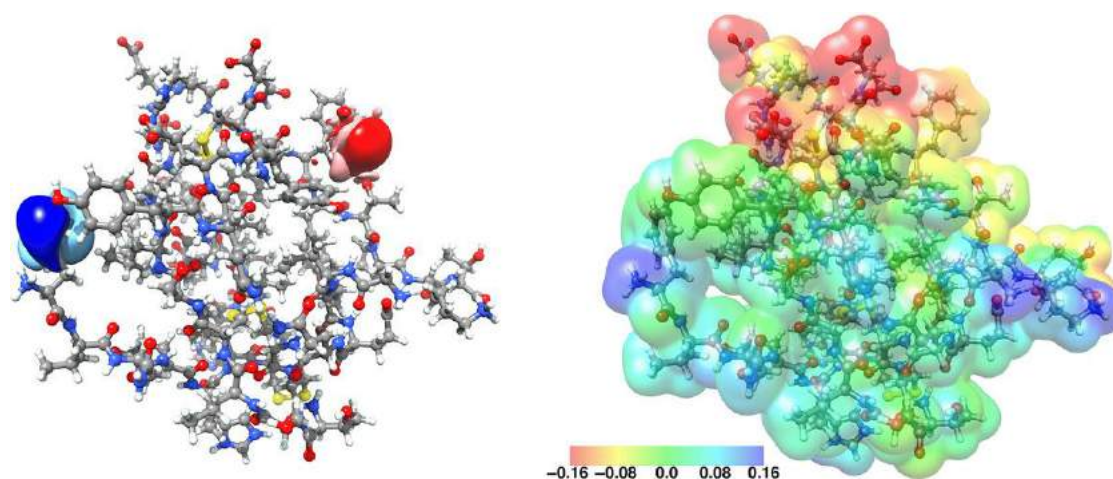


Рисунок 1. Иллюстрация работы программного модуля Dalton. Рисунок взят с ресурса <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/wcms.1172>.

Место установки программы:

/opt/lib/dalton/

Книги и статьи:

- Aidas K., Angeli C., Bak K. L. *The Dalton quantum chemistry program system*. // Wires computational molecular science, 2014, V. 4, Issue 3, P. 269–284.
- Kristensen K. *Self-Consistent Field Response Theory and Coupled-Cluster Theory*. // PhD dissertation, 2011.
- Ettenhuber P. *Size matters: Enabling large-scale coupled cluster calculations*. // PhD dissertation, 2015.
- Carey R., Bell G. *The Annotated VRML 2.0 Reference Manual*. // Addison-Wesley Professional, 1997.

Сетевые ресурсы:

- *Dalton and LSDalton*. <https://www.daltonprogram.org>
- *Dalton on Gitlab*. <https://gitlab.com/dalton/daltonprogram.org>
- *Dalton Developers's Guide*. <https://dalton-devguide.readthedocs.io>

Консультация по вопросам использования:

vtasks@jscs.ru

ПОДГОТОВЛЕНО:

Ведущий научный сотрудник



А.А. Рыбаков

Младший научный сотрудник



С.С. Шумилин

СОГЛАСОВАНО:

Заместитель директора



П.Н. Телегин

Главный инженер



В.М. Опалев

Главный программист



О.И. Вдовикин