ПРИЛОЖЕНИЕ 1

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, самтшетов, 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.online4) нажать на ссылку «Зарегистрироваться»;

2) В модуле регистрации необходимо убедиться, что выбрана роль «Школьник» (для школьников и учащихся СЛО):

3) Нажать на кнопку Зарегистрироваться;

4) Заполнить все поля формы Регистрации. Поля, отмеченные красной звездочкой (\*), являются обязательными для заполнения; I

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 видео­ инструкциями 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 3 D-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.