

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»



«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе
и экономическому развитию

Д.А. Зубцов

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Суперкомпьютерные технологии в аналитическом моделировании

по дисциплине:

по направлению:

профиль подготовки:

кафедра информатики и вычислительной математики

курс:

4

квалификация:

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 42 час.

Всего часов: 72, всего зач. ед.: 2

Количество курсовых работ, заданий: 2

Программу составил: И.В. Морозов, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры

2 февраля 2017 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

И.Б. Петров

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

получение знаний о методах атомистического моделирования и параллельных вычислений на современных суперкомпьютерах.

Задачи дисциплины

- освоение студентами базовых знаний в области компьютерного моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло;
- приобретение практических навыков создания программ атомистического моделирования;
- получение базовых представлений о способах распараллеливания программ моделирования;
- приобретение опыта работы на суперкомпьютерном кластере;
- оказание консультаций и помощи студентам в разработке программ и проведению численных экспериментов с применением атомистического моделирования в физике плазмы и конденсированного вещества, биофизике.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Суперкомпьютерные технологии в атомистическом моделировании относится к вариативной части образовательной программы

Дисциплина «Суперкомпьютерные технологии в атомистическом моделировании» базируется на дисциплинах:

Дифференциальные уравнения;
Математический анализ;
Информатика.

Дисциплина «Суперкомпьютерные технологии в атомистическом моделировании» предшествует изучению дисциплин:

Практикум по параллельному программированию.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования (ПК-1);
- способность анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения) (ПК-2);
- способность выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области (ПК-3);
- способность критически оценивать применимость применяемых методик и методов (ПК-4).

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- фундаментальные понятия, принципы и методы математического моделирования;
- физические основы методов молекулярной динамики и Монте-Карло;
- область применимости методов атомистического моделирования;
- технику проведения численного эксперимента;
- методы обработки результатов, полученных в результате атомистического моделирования;
- критерии проверки корректности результатов моделирования;
- методы статистической физики, используемые для анализа результатов атомистического моделирования;
- современные технологии параллельного программирования;
- принципы функционирования суперкомпьютерных кластеров;
- принципы работы гибридных вычислительных систем, включающих графические ускорители;
- принципы организации компьютерных грид-систем.

уметь:

- применять методы атомистического моделирования для решения задач в области физики плазмы и конденсированного вещества, биофизике, других областях науки и техники;
- составлять общую схему численного эксперимента;
- выбирать параметры моделирования для проведения численного эксперимента с учетом решаемой физической задачи;
- проводить оценку требуемых вычислительных ресурсов;
- исследовать применимость существующих пакетов атомистического моделирования для решения поставленной задачи;
- формулировать техническое задание на создание новых программ атомистического моделирования;
- выбирать оптимальные методы распараллеливания программ моделирования;
- создавать программы или отдельные модули для проведения моделирования;
- компилировать и запускать программы на суперкомпьютерных кластерах, контролировать правильность их выполнения, исправлять возможные ошибки;
- анализировать результаты моделирования и обобщать полученные данные;
- эффективно использовать современные информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

- навыками самостоятельной работы;
- культурой постановки и проведения численного моделирования;
- навыками работы с наиболее распространенными готовыми пакетами программ атомистического моделирования;
- средами разработки программ моделирования на современных алгоритмических языках;
- инструментами отладки последовательных и параллельных программ;
- средствами удаленного доступа к вычислительному кластеру;
- навыками работы с наиболее распространенными системами управления заданиями на суперкомпьютерных кластерах;
- навыками получения и обработки результатов атомистического моделирования;
- программами визуализации, построения графиков и диаграмм для наиболее понятного представления полученных результатов;
- практикой исследования и решения отдельных теоретических и прикладных задач.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

		Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу
--	--	--

№	Тема (раздел) дисциплины	Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Введение	2				3
2	Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью	2				5
3	Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью	2				5
4	Теоретические основы параллельных алгоритмов	2				3
5	Использование графических ускорителей	2				3
6	Введение в Grid- и Cloud- технологии	2				3
7	Основы метода молекулярной динамики	2				2
8	Модели взаимодействия частиц	8				4
9	Оптимизация и распараллеливание расчета взаимодействия частиц	2				4
10	Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц	2				2
11	Стохастические свойства динамических систем, моделирование релаксационных процессов	2				4
12	Комбинированные методы, основанные на МД	2				4
Итого часов		30				42
Подготовка к экзамену		0 час.				
Общая трудоёмкость		72 час., 2 зач.ед.				

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Введение

Зачем нужны суперкомпьютеры? Физические задачи, требующие больших вычислений. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом. Обсуждение последних редакций рейтингов Top-500 и Top-50. Качественный переход от последовательных к массивно-параллельным архитектурам и алгоритмам. Путь к Exaflop/s: вызовы и возможности. Обзор специализированных вычислительных устройств: графические ускорители, ПЛИС. Методы классической молекулярной динамики (МД) и Монте-Карло (МК): история, область применения, преимущества и недостатки. Положение методов МД и МК среди других вычислительных методов, многомасштабный подход. Примеры актуальных задач физики конденсированного вещества и неидеальной плазмы с демонстрацией результатов МД моделирования.

2. Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью

Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью

Классификация вычислительных систем. Реализация многозадачности в современных ОС. Процессы и потоки. Создание многопоточных приложений. Объекты синхронизации потоков: критическая секция, взаимное исключение, семафор, событие. Тупики (deadlocks). Проблемы недостаточной и избыточной синхронизации. Распараллеливание с использованием OpenMP, OpenCL и других технологий. Параллелизм по задачам и по данным. Методы распараллеливания циклов. Отладка параллельных приложений.

3. Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью

Кластеры типа Beowulf. Особенности параллельных алгоритмов на основе передачи сообщений. Стандарт MPI, компиляция и запуск программ с использованием пакетов MPICH, LAM MPI, OpenMP. Основные функции стандартов MPI-1 и MPI-2. Оптимизация обмена сообщениями между процессами. Односторонние коммуникации в библиотеках MPI и SHMEM. Примеры алгоритмов. Отладка MPI-приложений.

4. Теоретические основы параллельных алгоритмов

Теория функциональных устройств. Понятия загруженности, производительности и ускорения. Эффективность распараллеливания, законы Амдала. Информационная зависимость операций, графы исполнения. Параллельная форма алгоритма.

5. Использование графических ускорителей

Применение GPU для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений. Архитектура GPU, выпускаемых ведущими производителями. Ключевое значение параллелизма по данным. Организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти. Средства разработки программ для GPU. Кластеры на основе гибридных систем, включающих GPU. Примеры программ.

6. Введение в Grid- и Cloud- технологии

Метакомпьютинг. Понятие Grid. Виртуализация ресурсов. Основные требования к распределенным системам. Обзор современных технологий (GLOBUS, UNICORE и др.) и развитых Grid-сегментов (EGEE, NorduGrid, DEISA, российские Grid-сегменты). Иерархия сервисов Grid. Развитие пакета Globus и предоставляемые им базовые сервисы. Безопасность и аутентификация. Диспетчеризация заданий на Grid (resource brokers). Облачные технологии (Cloud computing) и их применение для научных расчетов.

7. Основы метода молекулярной динамики

Решение уравнений движения частиц. Ошибки интегрирования и ошибки округления. Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени. Начальные и граничные условия при интегрировании уравнений движения. Метод ближайшего образа. Применение термостатов и баростатов.

8. Модели взаимодействия частиц

Иерархия потенциалов взаимодействия для различной степени детализации моделируемой системы. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул: потенциалы Леннарда-Джонса, Бэкингема, Ми, Морзе. Моделирование макромолекул и полимеров. Многочастичные потенциалы для металлов, полупроводников и диэлектриков. Взаимодействие электронов и ионов, моделирование неидеальной плазмы.

9. Оптимизация и распараллеливание расчета взаимодействия частиц

Списки Верле. Связанные списки частиц в ячейках. Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству. Эффективность распараллеливания. Оптимизация для дальнедействующих потенциалов. Схема Эвальда. Алгоритм TreeMD для кулоновского взаимодействия.

10. Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц

История и обоснование метода. Алгоритм Метрополиса. Выбор амплитуды случайных источников. Примеры расчетов. Оптимизация алгоритма, Smart Monte-Carlo. Расчет термодинамических параметров и корреляционных функций. Бинарная корреляционная функция.

11. Стохастические свойства динамических систем, моделирование релаксационных процессов

Экспоненциальная расходимость траекторий в динамических системах. Показатель Ляпунова. Время динамической памяти. Влияние точности численной схемы на перемешивание траекторий. Статистический характер результатов МД и МК моделирования. Создание ансамбля начальных состояний для моделирования релаксационных процессов. Метастабильные состояния и фазовые переходы. Статистические методы исследования метастабильных систем. Возможности распараллеливания.

12. Комбинированные методы, основанные на МД

Метод частиц в ячейке (Particle-in-cell). Учет квантово-механических эффектов взаимодействия частиц. Квантовая молекулярная динамика. Алгоритмы, основанные на методе функционала плотности. Молекулярная динамика с волновыми пакетами.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций: учебный суперкомпьютерный кластер, компьютер преподавателя и мультимедийный проектор, для студентов возможность удаленного доступа к учебному кластеру.

6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература

1. Карпов В.Е., Коньков К.А. Основы операционных систем. М.: Интуит, 2004.
2. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. М.: БХВ-Санкт-Петербург, 2004.
3. Богачёв К.Ю. Основы параллельного программирования, М: Бином, 2003.
4. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. San Diego: Academic Press, 2002.

Дополнительная литература

1. Адинец А.В., Сахарных Н.А. О системе программирования вычислений общего назначения на графических процессорах // на сайте <http://www.parallel.ru/info/VVV>
2. J. A. Anderson, C. D. Lorenz, A. Travesset General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units.// Journal of Computational Physics. 2008. 227
3. Кривцов А.М., Кривцова Н.В., Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела. Дальневосточный математический журнал ДВО РАН, 2002, Т. 3, N 2, с. 254-276.
4. Sutmann G., Classical molecular dynamics. In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms (eds. J. Grotendorst, et al), Julich: NIC, Vol. 10, pp. 211-254, 2002.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Сайт Лаборатории параллельных информационных технологий НИВЦ МГУ <http://parallel.ru>
2. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>
3. Официальная документация и учебные пособия по MPI: <http://www.mcs.anl.gov/mmpi>, <http://www.lam-mpi.org>
4. Интернет-портал по Грид технологиям <http://www.gridclub.ru>
5. Официальный сайт Nordugrid : <http://www.nordugrid.org>
6. Официальный сайт проекта RDIG : <http://ca.grid.kiae.ru/RDIG>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Необходимое программное обеспечение: операционная система Window или Linux, программа удаленного терминала PuTTY, удаленный файловый менеджер WinSCP, текстовый редактор, программа построения графиков (на рабочих местах студентов и компьютере преподавателя), пакет моделирования LAMMPS (на учебном суперкомпьютерном кластере). Все указанное программное обеспечение является свободно распространяемым и не требует приобретения лицензии.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий курс должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой. Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы,
- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- решение задач, предлагаемых студентам в качестве курсового задания,
- подготовку к зачёту.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций.

Показателем владения материалом служит умение решать задачи.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к лектору или преподавателю, ведущему практические занятия.

10. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению:

профиль подготовки:

кафедра информатики и вычислительной математи

курс: 4

квалификация:

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Дифференцированный зачет

Разработчик: И.В. Морозов, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

- способность планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования (ПК-1);
- способность анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения) (ПК-2);
- способность выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области (ПК-3);
- способность критически оценивать применимость применяемых методик и методов (ПК-4).

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Суперкомпьютерные технологии в атомистическом моделировании» обучающийся должен:

знать:

- фундаментальные понятия, принципы и методы математического моделирования;
- физические основы методов молекулярной динамики и Монте-Карло;
- область применимости методов атомистического моделирования;
- технику проведения численного эксперимента;
- методы обработки результатов, полученных в результате атомистического моделирования;
- критерии проверки корректности результатов моделирования;
- методы статистической физики, используемые для анализа результатов атомистического моделирования;
- современные технологии параллельного программирования;
- принципы функционирования суперкомпьютерных кластеров;
- принципы работы гибридных вычислительных систем, включающих графические ускорители;
- принципы организации компьютерных грид-систем.

уметь:

- применять методы атомистического моделирования для решения задач в области физики плазмы и конденсированного вещества, биофизике, других областях науки и техники;
- составлять общую схему численного эксперимента;
- выбирать параметры моделирования для проведения численного эксперимента с учетом решаемой физической задачи;
- проводить оценку требуемых вычислительных ресурсов;
- исследовать применимость существующих пакетов атомистического моделирования для решения поставленной задачи;
- формулировать техническое задание на создание новых программ атомистического моделирования;
- выбирать оптимальные методы распараллеливания программ моделирования;
- создавать программы или отдельные модули для проведения моделирования;
- компилировать и запускать программы на суперкомпьютерных кластерах, контролировать правильность их выполнения, исправлять возможные ошибки;
- анализировать результаты моделирования и обобщать полученные данные;
- эффективно использовать современные информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

владеть:

- навыками самостоятельной работы;
- культурой постановки и проведения численного моделирования;
- навыками работы с наиболее распространенными готовыми пакетами программ атомистического моделирования;
- средами разработки программ моделирования на современных алгоритмических языках;
- инструментами отладки последовательных и параллельных программ;
- средствами удаленного доступа к вычислительному кластеру;
- навыками работы с наиболее распространенными системами управления заданиями на суперкомпьютерных кластерах;
- навыками получения и обработки результатов атомистического моделирования;
- программами визуализации, построения графиков и диаграмм для наиболее понятного представления полученных результатов;
- практикой исследования и решения отдельных теоретических и прикладных задач.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Промежуточная аттестация по осуществляется в форме дифференцированного зачета.

Зачет проводится на основе итогов текущей успеваемости и вопросов.

Вопросы:

1. Классификация вычислительных систем, таксономия Флинна. Примеры систем различного типа. Параллельные алгоритмы: распараллеливание по задачам и по данным.
2. Параллельные системы с общей памятью (SMP): ограничение на количество процессоров, проблема когерентности кэша. Архитектуры UMA и NUMA.
3. Потoki и процессы в многозадачных операционных системах. Состояния и переключение потоков операционной системой. Основные функции API POSIX Threads.
4. Синхронизация потоков. Примеры ошибок, связанных с отсутствием синхронизации. Объекты синхронизации: взаимное исключение, сигнал, объект Condvar. Тупики и необходимые условия их возникновения.
5. Общая схема программы на OpenMP. Общие и локальные переменные потоков. Распараллеливание циклов: алгоритмы распределения итераций по потокам, параметры schedule и reduction.
6. Системы с распределенной памятью (MPP): особенности программирования по сравнению с SMP системами. Типичная аппаратная конфигурация и программное обеспечение Beowulf кластера. Дополнительные функции, предоставляемые кластерным ПО.
7. Общая схема программы на MPI. Функции передачи сообщений между двумя процессами. Классификация функций по способу синхронизации. Блокирующие и неблокирующие функции приема-передачи. Способы передачи разнородных данных в одном сообщении.
8. Функции коллективного обмена сообщениями в MPI. Односторонние коммуникации (MPI-2).
9. Компиляция и запуск MPI-программ. Запуск MPI-программ с использованием системы очередей PBS.
10. Использование графических ускорителей (GPU) для научных вычислений. Особенности архитектуры GPU. За счет чего достигается ускорение по сравнению с обычными процессорами? Основные проблемы и ограничения при написании программ для GPU.
11. Концепция Грид. Структура Грид: сегмент, сайт, кластер, конечная система. Понятие виртуальной организации. Аутентификация и авторизация в Грид. Типы приложений для Грид.
12. Численное интегрирование уравнений движения частиц в молекулярно-динамической (МД) системе с применением разностных схем Эйлера и Верле (Leap-Frog). Требования к потенциалу взаимодействия.
13. Выбор шага интегрирования и оптимальной разностной схемы. Точность сохранения полной энергии и импульса при моделировании NVE ансамбля.
14. Общий характер взаимодействия нейтральных атомов и молекул в неидеальном газе. Потенциалы взаимодействия Леннарда-Джонса, Бэкингема, Морзе: физическое обоснование, область применимости.
15. Многочастичные потенциалы взаимодействия Tersoff и Embedded-Atom Method: физическое обоснование, область применимости.
16. Потенциалы взаимодействия для систем заряженных частиц. Учет квантовых эффектов на коротких расстояниях. Влияние кулоновского экранирования.
17. Граничные условия для МД ячейки. Метод ближайшего образа. Критерии выбора числа частиц.
18. Схема МД эксперимента. Как задать начальное состояние системы? Вывод МД системы на равновесие. Термостаты Берендсена, Ланжевена и Нозе-Хувера.

19. Метод Монте-Карло (МК) для моделирования систем многих частиц. Алгоритм Метрополиса. Выбор оптимальной амплитуды случайных источников.
20. Определение термодинамических величин (потенциальной энергии, давления) в равновесной системе методами МД и МК.
21. Расчет бинарной корреляционной функции. Определение фазы вещества.
22. Стохастичность МД систем. Экспоненциальная неустойчивость траекторий. Показатель Ляпунова. Время динамической памяти.
23. Моделирование релаксационных процессов и метастабильных состояний. Роль усреднения по ансамблю начальных состояний.
24. Оптимизация расчета межчастичного взаимодействия для короткодействующих потенциалов. Списки ближайших соседей (списки Верле), метод связанных списков. За счет чего достигается линейная масштабируемость по числу частиц?
25. Распараллеливание расчета взаимодействий между частицами: декомпозиция по пространству и по частицам.

4. Критерии оценивания

Оценка	Баллы	Критерии
отлично	10	Все посещения, все задания с дополнениями, активная работа на лекциях
	9	Все посещения, все задания и дополнения
	8	Все посещения, все задания
хорошо	7	Все посещения, не сделано ряд заданий
	6	Часть посещений, не сделано ряд заданий
	5	Часть посещений, не сделано ряд заданий
удовлетворительно	4	Часть посещений, одно задание
	3	Часть посещений, одно задание
неудовлетворительно	2	Часть посещений, ни одного задания
	1	Часть посещений, ни одного задания

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Во время проведения зачета обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, а также справочной литературы.

Зачет может проводиться по итогам текущей успеваемости и сдачи заданий, или путем организации специального опроса, проводимого в устной форме.