

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Национальный исследовательский университет
"Высшая школа экономики"**

Департамент прикладной математики

**Рабочая программа дисциплины
Введение в суперкомпьютерное моделирование**

для образовательной программы «Прикладная математика»
направления подготовки 01.03.04 Прикладная математика
уровень бакалавр

Разработчик(и) программы
Писарев В.В., к.ф.-м.н., vpisarev@hse.ru
Смирнов Г.С., к.ф.-м.н., gsmirnov@hse.ru

Одобрена на заседании Департамента прикладной математики
«__»_____ 201_ г.
Руководитель департамента
А.В. Белов _____ [подпись]

Утверждена Академическим советом образовательной программы
«__»_____ 201_ г., № протокола _____

Академический руководитель образовательной программы
Е.А. Буровский _____ [подпись]

Москва, 2017

Настоящая программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения подразделения-разработчика программы.

1 Область применения и нормативные ссылки

Настоящая программа учебной дисциплины устанавливает требования к образовательным результатам и результатам обучения студента и определяет содержание и виды учебных занятий и отчетности.

Программа предназначена для преподавателей, ведущих дисциплину «Введение в суперкомпьютерное моделирование», учебных ассистентов и студентов направления подготовки/специальности 01.03.04 «Прикладная математика», обучающихся по образовательной программе «Прикладная математика».

Программа учебной дисциплины разработана в соответствии с:

- Образовательным стандартом Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» по направлению подготовки 01.03.04 «Прикладная математика», квалификация: бакалавр
- Образовательной программой «Прикладная математика» направления 01.03.04 «Прикладная математика» подготовки бакалавра.
- Объединенным учебным планом университета по образовательной программе «Прикладная математика», утвержденным в 2017 г.

2 Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Введение в суперкомпьютерное моделирование» являются:

- Ознакомление студентов с основами устройства суперкомпьютерных систем и основными классами задач, решаемых с помощью суперкомпьютерных систем
- Ознакомление студентов с программными средствами, применяемыми в суперкомпьютерном моделировании
- Освоение студентами навыков работы с удаленным доступом на высокопроизводительных вычислительных системах

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Уровни формирования компетенций:

РБ — ресурсная база, в основном теоретические и предметные основы (знания, умения);

СД – способы деятельности, составляющие практическое ядро данной компетенции;

МЦ – мотивационно-ценностная составляющая, отражает степень осознания ценности компетенции человеком и готовность ее использовать

В результате освоения дисциплины студент осваивает компетенции:

Компетенция	Код по ОС ВШЭ	Уровень формирования компетенции	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенции	Форма контроля уровня сформированности компетенции
Способен работать с информацией: находить, оценивать и использовать информацию из различных источников, необходимую для	УК-5	СД	Использует онлайн-ресурсы для ознакомления с характеристиками высокопроизводительных вычислительных систем. Демонстрирует способность работы с документацией средств программирования и программных пакетов	Использование онлайн-ресурсов на семинарах, демонстрация работы с онлайн-документацией программных средств	

Компетенция	Код по ОС ВШЭ	Уровень формирования компетенции	Дескрипторы – основные признаки освоения (показатели достижения результата)	Формы и методы обучения, способствующие формированию и развитию компетенции	Форма контроля уровня сформированности компетенции
решения научных и профессиональных задач (в том числе на основе системного подхода)					
Способен использовать и развивать методы математического моделирования и применять аналитические и научные пакеты прикладных программ	ПК-11	РБ	Применяет программные средства, создаёт правильно работающие программы согласно созданному алгоритму	Ознакомление с технологиями создания программ для параллельных вычислений на многопроцессорных вычислительных системах. Практические задачи, написание программ в аудитории и самостоятельно.	

4 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Настоящая дисциплина относится к циклу профессиональных дисциплин.

Для специализаций «Математические и компьютерные методы для современных технологий» настоящая дисциплина является дисциплиной по выбору.

Изучение данной дисциплины базируется на следующих дисциплинах:

- Математический анализ.
- Информатика и программирование.

Для освоения учебной дисциплины студенты должны владеть следующими знаниями и компетенциями:

- Математический анализ.
- Языки программирования, Аппаратные средства вычислительной техники.

5 Тематический план учебной дисциплины

№	Название раздела	Всего часов	Аудиторные часы				Самостоятельная работа
			Лекции	Семинары	Практические занятия	Другие виды работы ¹	
1	История развития суперкомпьютерной техники		2				2
2	Классификация и устройство суперкомпьютерных		2	4			5

¹ Указать другие виды аудиторной работы студентов, если они применяются при изучении данной дисциплины.

	систем						
3	Масштабируемость параллельных задач.		2	4			15
4	Модели параллельных вычислений с общей и с распределенной памятью		2	2			10
5	Интерконнект в вычислительных кластерах		2	2			10
6	Параллелизуемые и последовательные алгоритмы		2	2			15
7	Стандарт параллельного программирования OpenMP		4	6			25
8	Стандарт параллельного программирования MPI		6	6			25
9	Математические библиотеки для прикладного программирования		6	6			25
	Итого		28	30			132

6 Формы контроля знаний студентов

Тип контроля	Форма контроля	1 год		Параметры **
		2	3	
Текущий	Контрольная работа		1	Контрольная работа на компьютере на 80 минут
	Эссе			
	Реферат			
	Коллоквиум			
	Домашнее задание	1	1	С письменным отчетом
	Самостоятельная работа			
	Лабораторная работа			
	Проект			
	Другие формы (указать)			
Промежуточный				
Итоговый	Экзамен			На компьютере; отчет в письменной форме с устным обсуждением

7 Критерии оценки знаний, навыков

Для прохождения контроля студент должен продемонстрировать знания основных определений и формул; умение запускать задачи на удаленной вычислительной системе и обрабатывать результат их выполнения; умение решать типовые задачи, аналогичные разобранным на семинарских занятиях.

Оценки по всем формам текущего контроля выставляются по 10-ти балльной шкале.

8 Содержание дисциплины

1. История развития суперкомпьютерной техники

История вычислительной техники. Понятие суперкомпьютера. Метрики производительности и списки Top500, Graph500, Green500, HPCG Top500, Top50 СНГ. Примеры задач современной физики и инженерных проблем, решаемых с помощью суперкомпьютеров.

2. Классификация, устройство и программное обеспечение суперкомпьютерных систем

Типы систем в списке Top500. Ограничения при создании суперкомпьютеров. Многопользовательский удаленный доступ. Типичный набор программного обеспечения для суперкомпьютера. Очереди пользовательских задач. Пакет графического анализа gnuplot.

3. Масштабируемость параллельных задач

Параллельная эффективность. Законы Амдала и Густафсона. Strong scaling и weak scaling. Модель Roofline оценки и оптимизации производительности.

4. Модели параллельных вычислений с общей и с распределенной памятью

Понятие систем с общей и распределенной памятью. Особенности алгоритмов при работе с распределенной памятью. SIMD вычисления. Синхронизация вычислений на многопроцессорных системах.

5. Интерконнект в вычислительных кластерах

Объединение узлов вычислительного кластера в единое вычислительное поле. Технологии интерконнекта. Характеристики интерконнекта: диаметр сети, пропускная способность, задержка передачи сообщения. Топология интерконнекта.

6. Параллелизуемые и последовательные алгоритмы

Примеры параллелизуемых и последовательных алгоритмов. Численное интегрирование функций. Метод прогонки и метод Гаусса для решения систем линейных уравнений. Метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло. Декомпозиция по частицам и декомпозиция по пространству в задачах динамики частиц.

7. Стандарт параллельного программирования OpenMP

Многопоточные приложения в системах с общей памятью. Применение OpenMP в языке C++. Компиляция OpenMP программ. Синхронизация потоков. Критические секции, атомарные операции. Распараллеливание циклов.

8. Стандарт параллельного программирования MPI

Концепция обмена сообщениями в системах с распределенной памятью. Компиляция и запуск MPI программ. Обмен сообщениями: двухточечные и коллективные обмены. Синхронизация процессов в MPI программах.

9. Математические библиотеки для прикладного программирования

Библиотеки линейной алгебры BLAS и LAPACK. Библиотека быстрого преобразования Фурье FFTW. Использование математических библиотек в программах. BLAS как стандарт. Уровни операций BLAS. Реализации: GSL, ATLAS, OpenBLAS.

9 Образовательные технологии

9.1 Методические рекомендации преподавателю

Даются по желанию автора. Методические рекомендации (материалы) преподавателю могут оформляться в виде приложения к программе дисциплины и должны указывать на средства и методы обучения, применение которых для освоения тех или иных тем наиболее эффективно.

9.2 Методические указания студентам

По всем заданиям нужно представить программный код и результаты, скрипты. Для запуска для нескольких процессоров очень желательно использовать скрипт `bash`. Все результаты усреднить и представить в виде графиков, желательно построенных в `gnuplot`, необходимых оценок, формул и кратких выводов. Полученные графики нужно аппроксимировать обоснованными формулами.

10 Оценочные средства для текущего контроля и аттестации студента

10.1 Оценочные средства для оценки качества освоения дисциплины в ходе текущего контроля

По всем заданиям нужно представить программный код и результаты, скрипты. Для запуска для нескольких процессоров очень желательно использовать скрипт `bash`. Все результаты усреднить и представить в виде графиков, желательно построенных в `gnuplot`, необходимых оценок, формул и кратких выводов. Полученные графики нужно аппроксимировать обоснованными формулами.

Примеры заданий:

- Вычисление числа ПИ.

Вычислить число ПИ методом численного интегрирования функции $1/(1+x^2)$ от 0 до 1. Написать последовательный и параллельный (OpenMP или MPI) алгоритмы для вычисления интеграла. Построить зависимость ускорения от числа потоков/процессов

- Анализ параллельной эффективности по законам Амдала и Густафсона

На примере задачи расчета Леннард-Джонсовской системы в пакете LAMMPS проанализировать ускорение при изменении числа узлов для задачи фиксированного размера и рост доступного размера задачи с числом узлов для фиксированного времени выполнения.

- Построение модели параллельной эффективности при наличии межпроцессорного обмена

Предложить формулу для параллельной эффективности задачи вычисления определенного интеграла, принимая во внимание необходимость обмена данными между процессами. Проверить предложенную зависимость на задаче вычисления интеграла/перемножении матриц/решении системы уравнений.

10.2 Примеры заданий промежуточной аттестации

Примеры вопросов для контроля знаний:

- Привести определения следующих архитектур: SIMD, «созвездие», кластер, массивно-параллельная система
- Сформулировать законы Амдала и Густафсона
- Оценить время передачи сообщения узел-узел размером P в сети с топологией 3-мерного тора $K*M*N$ с латентностью сети Δt и пропускной способностью W .
- Объяснить уровни операций BLAS
- Методы синхронизации параллельных программ

11 Порядок формирования оценок по дисциплине

Выполнение студентами текущих заданий на семинарских занятиях учитывается в рабочей ведомости и составляет оценку $O_{занятие}$. Самостоятельное выполнение студентами заданий, выданных на практических занятиях составляет оценку $O_{задание}$. Эти оценки, а также оценки за контрольную учитываются при выставлении накопленной оценки:

$$O_{накопленная\ за\ 2\ модуль} = 0,5 \cdot (O_{занятие} + O_{задание\ 2-го\ модуля}),$$

$$O_{накопленная\ за\ 3\ модуль} = 1/3 \cdot (O_{занятие} + O_{контрольная} + O_{задание\ 3-го\ модуля}),$$

Итоговая оценка по курсу выставляется по следующей формуле:

$$O_{итоговая} = 1/3 \cdot (O_{накопленная\ за\ 2\ модуль} + O_{накопленная\ за\ 3\ модуль} + O_{экзамен}).$$

Способ округления результирующей оценки по учебной дисциплине: арифметический.

12 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

12.1 Базовый учебник

12.2 Основная литература

- 1) Гергель, В. П. Современные языки и технологии параллельного программирования. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 406 с.
- 2) Антонов, А. С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP. М. Изд-во Моск. ун-та, 2012. - 339 с.
- 3) Лупин С.А., Посыпкин М.А. Технологии параллельного программирования. ФОРУМ, 2013. -205 с.

12.3 Дополнительная литература

- 1) В.П. Гергель, В.А. Фурсов. Лекции по параллельным вычислениям. С.: СГАУ, 2009, 164 с.
- 2) Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. М.: БХВ - Санкт-Петербург, 2004.

Источники в Интернете:

- 1) Сайт Лаборатории параллельных информационных технологий НИВЦ МГУ:
<http://parallel.ru>
- 2) <http://scitation.aip.org/>
- 3) <http://www.sciencemag.org/>
- 4) <http://www.elibrary.ru>

12.4 Справочники, словари, энциклопедии

12.5 Программные средства

Для успешного освоения дисциплины, студент использует следующие программные средства:

- Unix-система на кластере с системой очередей PBS или SLURM
- Компиляторы gcc и g++ и их аналоги с библиотеками OpenMP, MPI
- Библиотеки GSL, ATLAS, FFTW для языка C
- Пакет для графического анализа данных gnuplot
- Программные пакеты PuTTY, WinSCP, Xming

12.6 Дистанционная поддержка дисциплины

13 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Необходимое оборудование для лекций и практических занятий: компьютеры и мультимедийное оборудование (проектор), доступ к вычислительному кластеру. На компьютерах потребуются Putty, WinSCP, Xming