

Проект комиссии Президента
по модернизации и технологическому развитию экономики России
«Создание системы подготовки высококвалифицированных кадров
в области суперкомпьютерных технологий и
специализированного программного обеспечения»

УТВЕРЖДАЮ
Председатель экспертного совета
системы НОЦ СКТ, член-корр. РАН
В.В. Воеводин

" _____ " _____ 2011 г.

Программа дисциплины
**«СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АТОМИСТИЧЕСКОМ
МОДЕЛИРОВАНИИ»**

«010900 Прикладные математика и физика»

Разработчик: к.ф.-м.н И.В. Морозов

Москва

Учебно-методический план курса лекций

«СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АТОМИСТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ» МОРОЗОВ И.В.

1. Аннотация курса

Излагаются основные принципы атомистического моделирования и распараллеливания программ атомистического моделирования. В рамках атомистического моделирования описываются метод молекулярной динамики, уравнения движения частиц, модели взаимодействия частиц, квантовая молекулярная динамика. Излагаются необходимые основы суперкомпьютерных вычислений: суперкомпьютерные технологии, параллельные алгоритмы, программирование графических ускорителей, применение Грид-технологий и облачных вычислений.

Целями освоения дисциплины «СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АТОМИСТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ» являются ознакомление слушателей, специализирующихся в области атомистического моделирования, с современными высокопроизводительными вычислительными системами, с параллельными алгоритмами и программированием GPU.

Автор программы к.ф.-м.н. Морозов И.В. При чтении лекций используются компьютерные презентации.

2. Место дисциплины в учебном плане

В результате изучения дисциплины студент должен:

- Знать возможности и основные принципы атомистического моделирования;
- уметь применять суперкомпьютерные технологии для решения задач атомистического моделирования;
- владеть навыками параллельного программирования.

3. Содержание дисциплины

В курсе «СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АТОМИСТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ» излагаются основные принципы атомистического моделирования и распараллеливания программ атомистического моделирования. В рамках атомистического моделирования описываются метод молекулярной динамики, уравнения движения частиц, модели взаимодействия частиц, квантовая молекулярная динамика. Излагаются необходимые основы суперкомпьютерных вычислений: суперкомпьютерные технологии, параллельные алгоритмы, программирование графических ускорителей, применение Грид-технологий и облачных вычислений.

4. Перечень разделов курса

Суперкомпьютерные технологии в атомистическом моделировании

Часть 1. Основные принципы атомистического моделирования.

1. Введение. Метод молекулярной динамики
2. Уравнения движения частиц
3. Начальные условия, вывод системы на равновесие
4. Модели взаимодействия частиц: парные короткодействующие потенциалы взаимодействия
5. Модели взаимодействия частиц: многочастичные потенциалы, потенциалы с дальнодействием
6. Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц
7. Стохастические свойства динамических систем в задачах атомистического моделирования
8. Моделирование динамических и релаксационных процессов
9. Оптимизация расчета взаимодействия частиц
10. Квантовая молекулярная динамика

Часть 2. Распараллеливание программ атомистического моделирования

11. Современные суперкомпьютерные технологии
12. Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью: создание и управление потоками
13. Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью: синхронизация потоков
14. Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью: основы вычислительных систем с распределенной памятью
15. Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью: программирование с применением библиотеки MPI
16. Архитектура и программирование графических ускорителей
17. Применение графических ускорителей для задач атомистического моделирования
18. Применение Грид-технологий и облачных вычислений

Часть 1. Основные принципы атомистического моделирования

Введение. Метод молекулярной динамики. 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. Масштабируемость и эффективность распараллеливания методов МД и МК.

Уравнения движения частиц. Постановка задачи о движении частиц в методе молекулярной динамики. Разностные схемы для решения уравнений движения частиц. Ошибки интегрирования и ошибки округления. Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени. Интегралы движения. Граничные условия, метод ближайшего образа. Выбор размера основной ячейки.

Начальные условия, вывод системы на равновесие. Структура МД программы. Задание начального состояния системы, вывод на равновесие с заданной температурой. Применение термостатов и баростатов. Анализ равновесной МД траектории. Расчет термодинамических параметров и корреляционных функций. Бинарная корреляционная функция.

Модели взаимодействия частиц: парные короткодействующие потенциалы взаимодействия. Классификация потенциалов взаимодействия. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул: потенциалы Леннарда-Джонса, Бэкингема, Ми, Морзе. Отсечка потенциала на больших расстояниях. Силовые поля для макромолекул и полимеров.

Модели взаимодействия частиц: многочастичные потенциалы, потенциалы с дальним действием. Многочастичные потенциалы для металлов, полупроводников и диэлектриков. Дальнедействующие парные потенциалы, взаимодействие электронов и ионов, моделирование неидеальной плазмы.

Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц. История и обоснование метода. Метод статистических испытаний и нахождение определенных интегралов. Алгоритм Метрополиса. Выбор амплитуды случайных источников. Метод Монте-Карло для большого канонического ансамбля.

Стохастические свойства динамических систем в задачах атомистического моделирования. Необратимость и бифуркация. 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. Метастабильные состояния и фазовые переходы. Статистические методы исследования метастабильных систем.

Моделирование динамических и релаксационных процессов. Исследование динамических свойств равновесных систем с применением теории линейного отклика и аппарата временных корреляционных функций. Создание ансамбля начальных состояний для моделирования релаксационных процессов в неравновесных системах. Возможности распараллеливания.

Оптимизация расчета взаимодействия частиц. Общие принципы оптимизации программ атомистического моделирования. Оптимизация для

короткодействующих потенциалов. Списки ближайших соседей. Связанные списки частиц в ячейках. Параллельные алгоритмы: декомпозиция по частицам и по пространству. Эффективность распараллеливания. Оптимизация для далекодействующих потенциалов.

Квантовая молекулярная динамика. Учет квантово-механических эффектов взаимодействия частиц. Молекулярная динамика с волновыми пакетами. Квантовая молекулярная динамика. Методы, основанные, на теории функционала плотности.

Часть 2. Распараллеливание программ атомистического моделирования.

Современные суперкомпьютерные технологии. Применение суперкомпьютеров. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом. Обсуждение последних редакций рейтингов Top-500 и Top-50. Тенденции развития суперкомпьютеров. Качественный переход от последовательных к массивно-параллельным архитектурам и алгоритмам. Путь к Exaflop/s: вызовы и возможности. Классификация вычислительных систем.

Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью: создание и управление потоками. Поддержка параллелизма на уровне операционной системы. Процессы и потоки. Создание многопоточных программ с использованием базовых средств операционных систем. Распараллеливание с использованием OpenMP, OpenCL и других технологий. Параллелизм по задачам и по данным. Методы распараллеливания циклов. Автоматическое распараллеливание циклов.

Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью: синхронизация потоков. Проблемы недостаточной синхронизация потоков. Объекты синхронизации потоков: критическая секция, взаимное исключение, семафор, событие. Проблемы избыточной синхронизации потоков, тупики. Синхронизация в OpenMP. Отладка параллельных приложений.

Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью: основы вычислительных систем с распределенной памятью. Аппаратная организация современного кластера. Кластеры типа Beowulf. Аппаратная организация современного кластера. Средства разработки программ для систем с распределенной памятью. Особенности параллельных алгоритмов на основе передачи сообщений.

Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью: программирование с применением библиотеки MPI. История создания MPI. Классификация функций MPI и основные понятия. Функции двухточечного обмена сообщениями. Коллективные функции обмена сообщениями. Дополнительные возможности стандарта MPI-2. Оптимизация обмена сообщениями между процессами. Односторонние коммуникации. Примеры алгоритмов.

Архитектура и программирование графических ускорителей. Сравнение архитектуры графических ускорителей и универсальных процессоров. Применение GPU для вычислений, не связанных с обработкой графических изображений. Ключевое значение параллелизма по данным. Особенности внутренней памяти графических ускорителей и избежание задержек, связанных с обращением к памяти. Средства разработки программ для GPU.

Применение графических ускорителей для задач атомистического моделирования. Поддержка вычислений на гибридных системах в существующих пакетах атомистического моделирования. Ускорение расчетов с короткодействующими и дальнедействующими потенциалами взаимодействия. Сопоставление результатов для различных потенциалов взаимодействия. Эффективность использования кластеров из нескольких ГПУ.

Применение Грид-технологий и облачных вычислений. Обзор технологий распределенных вычислений. Распределенные вычисления в Интернет (метакомпьютинг). Вычисления на Грид. Облачные (рассеяные) вычисления. Виртуализация ресурсов. Основные требования к распределенным системам. Обзор современных технологий (GLOBUS, UNICORE и др.) и развитых Grid-сегментов (EGEE, NorduGrid, DEISA, российские Grid-сегменты). Безопасность и аутентификация в Грид. Использование Грид для задач атомистического моделирования.

5. Тематический план курса

Распределение часов курса по темам и видам работ представлено в таблице 1

Таблица 1

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Трудоёмкость	Всего часов				Самостоятельная работа	Форма контроля
			в том числе					
			Аудиторные занятия					
Всего	Лекции	Практические занятия						
1.	Основные принципы атомистического моделирования	36	36	20	8	8	Тест	
1.1.	Введение. Метод молекулярной динамики.	2	2	2	0	0		
1.2.	Уравнения движения частиц	4	4	2	2	0		
1.3.	Начальные условия, вывод системы на равновесие	2	2	2	0	0		
1.4.	Модели взаимодействия частиц	8	8	4	0	2		

№№ п/п	Наименование модулей, разделов, дисциплин	Всего часов					Форма контроля
		Трудоёмкость	в том числе				
			Аудиторные занятия			Самостоятельная работа	
			Всего	Лекции	Практические занятия		
1.5.	Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц	4	4	2	2	0	
1.6.	Стохастические свойства динамических систем в задачах атомистического моделирования	4	4	2	0	2	
1.7.	Моделирование динамических и релаксационных процессов	4	4	2	2	0	
1.8.	Оптимизация расчета взаимодействия частиц	4	4	2	2	0	
1.9.	Квантовая молекулярная динамика	6	6	2	0	4	
2.	Распараллеливание программ атомистического моделирования	36	36	16	10	10	Тест
2.1.	Современные суперкомпьютерные технологии	4	4	2	0	2	
2.2.	Параллельные алгоритмы для систем с общей памятью	8	8	4	4	2	
2.3.	Параллельные алгоритмы для систем с распределенной памятью	8	8	4	4	2	
2.4.	Применение графических ускорителей для задач атомистического моделирования	8	8	4	2	2	
2.5.	Применение Грид-технологий и облачных вычислений	8	8	2	0	2	
	ИТОГО:	54	54	36	18	0	