

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

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

**Программа дисциплины**  
**«ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В НАУЧНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЯХ»**

**«230100.68 "Информатика и вычислительная техника"»**  
**«230400.68 "Информационные системы и технологии"»**

Разработчик: к.ф.-м.н., Пустовалов Е.В.  
Рецензент:

Москва

## Учебно-методический план курса лекций

### «ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»

Пустовалов Е.В.

#### 1. Аннотация курса

Данный курс является модулем специализированных дисциплин, предназначенных студентам/магистрантам старших курсов естественнонаучных специальностей. Курс читается во I семестре. Длительность курса 72 часа, включая 36 лекционных часов, 28 часов практических занятий и 8 часов самостоятельной работы. В конце семестра сдаются курсовые работы. Автор программы к.ф.-м.н. Пустовалов Е.В. Лектор 2011/12 учебного года к.ф.-м.н. Пустовалов Е.В. При чтении лекций используются компьютерные презентации.

#### 2. Место дисциплины в учебном плане.

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать: основы метода просвечивающей электронной микроскопии, особенности формирования изображений в просвечивающей электронной микроскопии, основные этапы методы и алгоритмы цифровой обработки изображений, основы высокопроизводительных вычислений на графических процессорах, основы технологии CUDA.

Уметь: пользоваться основными алгоритмами обработки электронно-микроскопических изображений, применяя технологии высокопроизводительных вычислений на графических процессорах.

Владеть: математическим аппаратом обработки изображений, специализированным программным обеспечением для выполнения расчетов на GPU.

#### 3. Содержание дисциплины.

*Перечень разделов курса (в том числе перечень тем семинарских занятий, при наличии описание практикума, коллоквиума).*

Программа учебного курса содержит три раздела.

Первый раздел посвящен основам просвечивающей электронной микроскопии. Рассматриваются теоретические основы электронной оптики, механизмы формирования изображения в просвечивающем электронном микроскопе, фазовый и амплитудный контраст, передаточные функции.

Второй раздел посвящен основам цифровой обработки изображений. Приводятся основные стадии и методы цифровой обработки изображений.

Рассматриваются стадии обработки изображений – регистрация, улучшение, восстановление, сжатие, морфологическая обработка, сегментация, основы пространственной фильтрации, сглаживающие фильтры, фильтры, основанные на порядковых статистиках, пространственные фильтры повышения резкости и другие.

В третьем разделе рассматриваются основы высокопроизводительных вычислений с использованием графических процессоров (GPU). Рассматривается архитектура современных GPU, дается классификация параллельных систем, изложены основы технологии и архитектуры CUDA.

#### **4. Перечень разделов курса.**

**Просвечивающая электронная микроскопия. Теоретические основы электронной оптики.** Метод электронной микроскопии. Пространственное разрешение. Рентгеновский микроанализ. Интенсивность источника. Фокальной плоскостью линзы. Сферическая абберрация, хроматическая абберрация и астигматизм.

**Формирование изображения в просвечивающем электронном микроскопе.** Рэлеевский критерий. Волновая функция. Дифракция.

**Кинематическое приближение рассеяния электронов объектом. Дифракция от кристалла. Функция прохождения.** Уравнение Шредингера. Электростатический потенциал. Первое приближение Борна. Фурье потенциал. Вектор обратного пространства. Построение Эвальда. Обратное преобразование Фурье.

**Фазовый и амплитудный контраст. Передаточная функция.** Принцип Гюйгенса. Оптический фазовый контраст Цернике. Эффективное поглощение электронов в объекте. Величина дефокусировки объективной линзы. Формула Шерцера.

**Основные стадии цифровой обработки изображений.** Радиально симметричные линзы. Отрицательные коэффициенты абберрации. Цифровая обработка изображений. Функция рассеяния точки. Регистрация изображения. Улучшение изображения. Восстановление изображений. Вейвлеты. Морфологическая обработка. Повышение резкости. Устранение шума. Двусторонняя фильтрация.

**Основы пространственной фильтрации.** Линейная пространственная фильтрация. Нелинейные пространственные фильтры.

**Сглаживающие пространственные фильтры. Линейные сглаживающие фильтры. Пространственные фильтры повышения резкости.**

Расфокусировка изображения и подавления шума. Выход (отклик) простейшего линейного сглаживающего пространственного фильтра. Низкочастотные фильтры. Однородный усредняющий фильтр. Взвешенное среднее. Сглаживание изображения по маскам различных размеров. Медианный фильтр. Фильтр максимума. Использование медианной фильтрации для подавления шума. Повышение резкости изображений.

**Высокопроизводительные вычисления на графических процессорах.** Диспетчер потоков. Регистры графического процессора.

**Особенности архитектуры современных GPU. История вычислений на GPU.** Процент пиковой производительности. Графический вычислительный кластер. Фиксированная функциональность. Графические языки программирования.

**Принципиальная разница между CPU и GPU. Классификация параллельных вычислительных систем.** Ячейки линейной и однородной памяти. Последовательные компьютеры. Конвейерные архитектуры. Системы с общей памятью.

**Gpgpu на примере использования технологии CUDA.** Гетерогенная вычислительная модель. Параллелизм.

**Архитектура параллельных вычислений cuda.** Умножение матриц. GPU nVidia GeForce 8800GTX. Коэффициента повторного использования. Мультиплатформенный.

**Общие подходы распараллеливания физических задач с использованием OpenMP.** Критические секции. Проблема совместного доступа к памяти. Общий кэш. Оперативная память.

**Моделирование физических процессов и визуализация результатов на графических процессорах.** Волновая функция. Изменение фазы. Параметр взаимодействия. Слабофазовый объект.

**Алгоритм вычислений и визуализации. Программная реализация.**

Вычисление проекции потенциала и волновой функции. Расчет передаточной функции. Нормировка изображения.

**Пример атомной структуры и ее визуализации.** Размещаемая память. Число элементов.

**Примеры использования GPU.** Моделирование физических процессов. Обработка изображений. Преобразование Фурье.

**Программные и аппаратные особенности параллельных вычислений на GPU.** Поточковые процессоры. Вещественные и целочисленные вычисления.

## **5. Тематический план курса.**

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

Таблица 1

№ п/п	Наименование тем и разделов	Всего (часов)	Лекции (часов)	Практика (часов)	Самостоятельная работа (часов)
1.	Просвечивающая электронная микроскопия. Теоретические основы электронной оптики	2	2		
2.	Формирование изображения в просвечивающем электронном микроскопе.	2	2		
3.	Кинематическое приближение рассеяния электронов объектом. Дифракция от кристалла. Функция прохождения	2	2		
4.	Фазовый и амплитудный контраст. Передаточная функция.	2	2		
5.	Основные стадии цифровой обработки изображений.	2	2		
6.	Основы пространственной фильтрации	2	2		
7.	Сглаживающие пространственные фильтры. Линейные сглаживающие фильтры. Пространственные фильтры повышения резкости.	2	2		
8.	Высокопроизводительные вычисления на графических процессорах	2	2		
9.	Особенности	2	2		

	архитектуры современных GPU. История вычислений на GPU				
10.	Принципиальная разница между CPU и GPU. Классификация параллельных вычислительных систем.	2	2		
11.	GPGPU на примере использования технологии CUDA.	7	2	4	1
12.	Архитектура параллельных вычислений CUDA	3	2		1
13.	Общие подходы распараллеливания физических задач с использованием OpenMP	7	2	4	1
14.	Моделирование физических процессов и визуализация результатов на графических процессорах	7	2	4	1
15.	Алгоритм вычислений и визуализации. Программная реализация.	7	2	4	1
16.	Пример атомной структуры и ее визуализации.	7	2	4	1
17.	Примеры использования GPU	7	2	4	1
18.	Программные и аппаратные особенности параллельных вычислений на GPU.	7	2	4	1
<b>ИТОГО:</b>		72	36	28	8

## 6. Литература и Web-источники

1. Вайнштейн Б.К., Электронная микроскопия атомного разрешения // Успехи физических наук, 1987, т.152, вып.1, стр. 75-120.
2. Гонсалес Р.С. и др. Цифровая обработка изображений. (Digital Image Processing) - М.: Техносфера, 2005, - 1072 С.
3. Воеводин Вл. В., Жуматий С. А. Вычислительное дело и кластерные системы. –М.: Изд-во МГУ, 2007. – 150 с.
4. Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2011, -232 с.
5. Нестеренко Д.В., Формирование и обработка изображений электронной микроскопии. // Компьютерная оптика, 2011, том 35, №2
6. Фролов В. Введение в технологию CUDA // Компьютерная графика и мультимедиа. 2008, № 6 (1). <http://cgm.computergraphics.ru/issues/issue16/cuda>
7. Скрыбин В. История появления графических процессоров // Компьютерная графика и мультимедиа. 2010, №8(1). <http://cgm.computergraphics.ru/issues/issue18/gpuhistory>
8. Graphics processing unit: [http://en.wikipedia.org/wiki/Graphics\\_processing\\_unit](http://en.wikipedia.org/wiki/Graphics_processing_unit)
9. What is CUDA?: [http://www.nvidia.com/object/what\\_is\\_cuda\\_new.html](http://www.nvidia.com/object/what_is_cuda_new.html)
10. Что такое вычисления на GPU?: [www.nvidia.ru/page/gpu\\_computing.html](http://www.nvidia.ru/page/gpu_computing.html)
11. Графический процессор: <http://www.megabook.ru/Article.asp?AID=607324>
12. Краткая история и основные принципы работы 3D-ускорителей: <http://www.izcity.com/data/hard/article528.htm>
13. Графические процессоры для высокопроизводительных вычислений: <http://gpu.parallel.ru/>