

Программа дисциплины

Методы программирования в моделировании физических процессов

Программу составил: А.В. Тимофеев, к. ф.-м. н.

Цель дисциплины

Цель дисциплины - ознакомление студентов с технологиями параллельного программирования для дальнейшего использования при решении ресурсоёмких вычислительных задач математической физики и компьютерного моделирования на многопроцессорных вычислительных системах

Задачи дисциплины

- ознакомление обучающихся с предметом, принципами, методами параллельного программирования;
- приобретение обучающимися практических умений и навыков, необходимых для работы с многопроцессорными вычислительными системами;
- формирование умений и навыков для применения полученных знаний для решения обучающимися ресурсоёмких вычислительных задач на многопроцессорных вычислительных системах.

Содержание дисциплины

1. Введение в математическое и компьютерное моделирование

Зачем нужны суперкомпьютеры? Задачи, требующие больших вычислений. Обзор рейтинга Top-500. Метод классической молекулярной динамики и Монте-Карло: история, область применения, преимуществ, недостатки, положение среди других вычислительных методов. Примеры актуальных задач физики конденсированного вещества и неидеальной плазмы с демонстрацией результатов МД моделирования.

2. Введение в операционную систему Unix. Программирование для Bash

Linux. Основные понятия. Навигация, основные команды. Создание, удаление и копирование файлов. Каталоги. Понятие учётной записи. Права доступа в Linux. Процессы в Linux. Понятие скриптов в Unix-системах. Интерпретаторы скриптов. Командная оболочка bash. Особенности работы. Программирование для Bash: переменные, ветвление, циклы. Арифметические операторы. Работа с файлами: перенаправление ввода и вывода, конвейерная обработка данных (pipes), регулярные выражения. Работа с аргументами командной строки. Оптимизация рутинных задач на примере .bashrc.

3. Компиляция и запуск программ. Вспомогательные программы

Компиляция и запуск программ. Представление о работе компиляторов (для C/C++ - объектные файлы и библиотеки, заголовочные файлы, система сборки, зависимости). Текстовые редакторы (vim, ...). Обзор основных возможностей gnuplot. Использование скриптов.

4. Основы параллелизации на OpenMP и PosixThreads

Компиляция и запуск программ. Принципы параллелизации. Потоки.

5. Введение в основы параллельного программирования с использованием технологии MPI

Последовательная и параллельная модели программирования. Парадигмы параллельного программирования и соответствующие программные средства. Программная реализация MPI. Типовые схемы организации параллельных MPI-программ и их структура. Компиляция и запуск MPI-программ. Проблема поиска ошибок. Исследование вычислительного кластера с помощью средств MPI и Bash. Оценка производительности многопроцессорных вычислительных систем.

6. Основы MPI. Двухточечные и коллективные обмены

Организация двухточечных обменов. Блокирующие операции: режимы, реализация в MPI, примеры. Стандартный обмен, обмен с буферизацией, обмен “по готовности”. Проблемы при организации двухточечных обменов. Неблокирующие операции. Широковещательная рассылка. Операции распределения и сбора данных, операция приведения. Синхронизация в параллельном программировании. Средства синхронизации в MPI.

7. Теоретические основы параллельных алгоритмов

Теория функциональных устройств. Понятия загруженности, производительности и ускорения. Эффективность распараллеливания, законы Амдала. Информационная зависимость операций, графы исполнения. Параллельная форма алгоритма. Модель вычислений в виде графа "операции – операнды". Основные показатели качества параллельных методов — ускорение, эффективность (efficiency), стоимость (cost) и масштабируемость (scalability) вычислений. Базовые принципы разработки параллельных алгоритмов. Основные понятия, все этапы создания и анализа параллельных алгоритмов.

8. Параллельные методы умножения матрицы на вектор и на матрицу, решения систем линейных уравнений

Постановка задачи и последовательный алгоритм ее решения. Методы разделения матрицы между процессорами вычислительной системы, которые необходимы для параллельной реализации матричных операций. Три возможных подхода к параллельной реализации алгоритма умножения матрицы на вектор. Возможные подходы к параллельной реализации алгоритма умножения матриц и наиболее широко известные алгоритмы: алгоритм, основанный на ленточной схеме разделения данных, алгоритм Фокса (Fox) и алгоритм Кэннона (Cannon). Задача решения систем линейных уравнений. Необходимые определения и постановка задачи. Последовательный и параллельный варианты одного из прямых методов решения линейных систем общего вида – метода Гаусса. Описание последовательного и параллельного алгоритмов, реализующих итерационный метод сопряженных градиентов.

9. 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. Иерархия потенциалов взаимодействия для различной степени детализации моделируемой системы. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул. Моделирование макромолекул и полимеров. Многочастичные потенциалы для металлов, полупроводников и диэлектриков. Взаимодействие электронов и ионов, моделирование неидеальной плазмы.

10. Моделирование конкретных физических систем

Рассмотрение и реализация: гравитационной задачи; системы частиц, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса; простейших физических задач.

11. 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 далекодействующих потенциалов. Схема Эвальда.

12. 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.