

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
(ОИВТ РАН)

Принято на Ученом совете  
ОИВТ РАН  
Протокол № 3 от 21.06.2022

«Утверждаю»

Директор ОИВТ РАН

Олегович Петров О.Ф.

2022 год



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

дисциплины «Молекулярное моделирование на современных  
суперкомпьютерах»

направление подготовки: **04.06.01 «Химические науки»**  
(направленность – 1.4.4 Физическая химия)

Квалификация

**Исследователь. Преподаватель-исследователь.**

Москва  
2022

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Молекулярное моделирование на современных суперкомпьютерах» является ознакомление с методами молекулярной динамики (МД) и Монте-Карло (МК) для решения задач физики плазмы и конденсированного вещества, физической химии и биологии, а также получение навыка использования современных суперкомпьютеров для проведения численных экспериментов с применением указанных методов.

### Задачами данного курса являются:

- формирование представлений о постановке численного эксперимента с использованием методов атомистического моделирования для прикладных и фундаментальных исследований в естественных науках;
- получение знаний о моделях взаимодействия атомов и молекул, методах решения уравнений динамики частиц, теоретических основах статистической обработки результатов численных экспериментов;
- выработка умений использования готовых пакетов программ молекулярного моделирования, работы на суперкомпьютерных вычислительных системах в качестве пользователя;
- приобретение навыков создания программ молекулярно-динамического моделирования, разработки параллельных программ для систем с общей и распределенной памятью.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП АСПИРАНТУРЫ

Дисциплина «Вычислительные методы в моделировании» базируется на материалах по дисциплинам «Высшая математика» (математический анализ, высшая алгебра, дифференциальные уравнения и методы математической физики), блока «Общая физика». Освоение курса необходимо для разносторонней подготовки к профессиональной деятельности, включающей как проведение фундаментальных исследований, так и постановку и решение инженерных задач с использованием современной компьютерной техники.

## 3. УРОВЕНЬ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре.

## 4. ГОД И СЕМЕСТР ОБУЧЕНИЯ

Второй год, третий семестр обучения.

## 5. ОБЪЁМ УЧЕБНОЙ НАГРУЗКИ И ВИДЫ ОТЧЁТНОСТИ.

<b>Вариативная часть, в т.ч.:</b>	<u>5</u> зач. ед.
лекции	<u>36</u> часов
практические занятия	<u>54</u> часов
лабораторные работы	<u>нет</u>
индивидуальные занятия с преподавателем	<u>нет</u>
<b>Самостоятельные занятия</b>	<u>90</u> часов
<b>ВСЕГО</b>	<b>5зач. ед., 180часов</b>

## 6. КОНКРЕТНЫЕ ЗНАНИЯ, УМЕНИЯ И НАВЫКИ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В результате освоения дисциплины «Физико-химические процессы в газоразрядной плазме» обучающийся должен:

### 1. Знать:

- цели и задачи научных исследований в области молекулярного моделирования, базовые принципы и методы их организации, основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов;
- область применения современных суперкомпьютеров, роль компьютерного моделирования в современных научных исследованиях;
- сферу применения методов атомистического моделирования в задачах физики, химии, биологии;
- основные законы и формулы, необходимые для построения численных схем, граничных и начальных условий, моделей взаимодействия частиц в методах молекулярной динамики и Монте-Карло;
- архитектуру и основные характеристики современных суперкомпьютерных систем.

### 2. Уметь:

- выделять и систематизировать основные идеи в научных статьях по методологии и результатам атомистического моделирования, критически оценивать поступающую информацию, избегать автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач;
- проектировать и создавать новые параллельные программы, выбирать оптимальные алгоритмы распараллеливания, в том числе, для задач атомистического моделирования;
- анализировать результаты атомистического моделирования и обобщать полученные данные;
- компилировать и запускать программы на суперкомпьютерных кластерах, контролировать правильность их выполнения, выявлять и исправлять типичные ошибки.

### 3. Владеть:

- навыками обсуждения результатов молекулярного моделирования, делая важные замечания и отвечая на вопросы;
- навыками работы со стандартным программным обеспечением суперкомпьютерных кластеров;
- навыками работы с наиболее распространенными пакетами атомистического моделирования;
- навыками создания и отладки параллельных программ на суперкомпьютерных кластерах;
- навыками проведения простейших численных экспериментов методами молекулярной динамики и Монте-Карло.

## 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Структура дисциплины

Перечень разделов дисциплины и распределение времени по темам:

№ раздела и название	Количество часов
1. Методы молекулярного моделирования	50
2. Архитектура и принципы работы суперкомпьютеров	12
3. Параллельное программирование для систем с общей памятью	48

4. Параллельное программирование для систем с распределенной памятью	36
5. Оптимизация и распараллеливание в задачах молекулярного моделирования	34
ВСЕГО (часов)	180

### Вид занятий

#### Лекции:

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость (количество часов)
1	История и основные положения методов молекулярного моделирования	2
2	Решение уравнений движения в методе молекулярной динамики	2
3	Начальные и граничные условия	2
4	Модели взаимодействия частиц	2
5	Метод Монте-Карло	2
6	Высокопроизводительные вычислительные системы	2
7	Классификация вычислительных систем и алгоритмов	2
8	Внутренний параллелизм современных процессоров	2
9	Разделение процессорного времени в операционных системах	2
10	Проблемы синхронизации потоков в системах с общей памятью	2
11	Технология OpenMP	2
12	Теоретические основы параллельных алгоритмов	2
13	Программное обеспечение суперкомпьютерного кластера	2
14	Основы технологии MPI	2
15	Функции коллективного обмена сообщениями в MPI	2
16	Оптимизация расчета взаимодействия частиц	2
17	Параллельные алгоритмы в молекулярном моделировании	2
18	Применение графических ускорителей для задач молекулярного моделирования	2
	ВСЕГО (часов)	36

#### Практические занятия:

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость (количество часов)
2	Реализация схемы решения уравнений движения в методе молекулярной динамики	4

3	Реализация начальных условий (случайное распределение, кристаллическая решетка) и метода ближайшего образа	2
4	Реализация модуля расчета взаимодействий между частицами на основе потенциала Леннарда-Джонса	4
5	Реализация алгоритма Метрополиса	4
9	Простейшая многопоточная программа с использованием библиотеки POSIXThreads	4
10	Вычисление определенного интеграла с использованием библиотеки POSIXThreads	4
11	Вычисление определенного интеграла с использованием технологии OpenMP	4
12	Определение и устранение проблем синхронизации в многопоточных программах	4
13	Работа на учебном суперкомпьютерном кластере и запуск задач с использованием системы очередей PBS	4
14	Вычисление определенного интеграла с использованием библиотеки MPI	4
15	Алгоритмы «циклический сдвиг» и «эстафета» с использованием библиотеки MPI	4
16	Распараллеливание расчета взаимодействий в программе МД моделирования с использованием OpenMP	4
17	Распараллеливание расчета траекторий в программе МД моделирования с использованием MPI	4
18	Создание простейшей программы для графических ускорителей в среде программирования NVidiaCUDA	4
ВСЕГО (часов)		54

### Самостоятельная работа:

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость (количество часов)
1	- изучение теоретического курса – выполняется самостоятельно каждым обучаемым по итогам каждой из лекций, результаты контролируются преподавателем на лекционных занятиях, используются конспект (электронный) лекций, учебники, рекомендуемые данной программой, методические пособия.	50
2	- решение задач по заданию преподавателя– решаются задачи, выданные преподавателем по итогам лекционных занятий и сдаются в конце семестра, используются конспект (электронный) лекций, учебники, рекомендуемые данной программой, а также сборники задач, включая	24

	электронные, учебно-методические пособия.	
3	Подготовка к дифференцированному зачету	16
ВСЕГО (часов)		90

### Содержание дисциплины

№ п/п	Название модулей	Разделы и темы лекционных занятий	Содержание	Объем	
				Аудиторная работа (часы)	Самостоятельная работа (часы)
1	I Методы молекулярного моделирования	История и основные положения методов молекулярного моделирования	История и направление развития методов молекулярного моделирования, необходимость применения суперкомпьютеров. Типы моделируемых систем и процессов. Обзор пакетов молекулярного моделирования.	2	2
2		Решение уравнений движения в методе молекулярной динамики	Решение уравнений движения частиц. Ошибки интегрирования и ошибки округления. Точность сохранения энергии в МД системе. Выбор оптимального шага по времени	6	6
3		Начальные и граничные условия	Начальные и граничные условия при интегрировании уравнений движения. Метод ближайшего образа. Применение термостатов и баростатов	4	6
4		Модели взаимодействия частиц	Иерархия потенциалов взаимодействия частиц для различной степени детализации моделируемой системы. Модели взаимодействия нейтральных атомов и молекул, силовые поля для биологических систем, многочастичные потенциалы для металлов. Явное моделирование динамики электронов, классическая и квантовая молекулярная динамика.	6	6

5		Метод Монте-Карло	Метод Монте-Карло для моделирования систем многих частиц. История и обоснование метода. Алгоритм Метрополиса. Выбор амплитуды случайных источников.	6	6
6	II Архитектура и принципы работы суперкомпьютеров	Высокопроизводительные вычислительные системы	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. Технологические проблемы повышения быстродействия компьютеров, путь к экзафлопсной производительности. Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров.	2	2
7		Классификация вычислительных систем и алгоритмов	Классификация вычислительных систем. Параллелизм по задачам и по данным. Системы с общей и распределенной памятью. Кластеры типа Beowulf как основа современных высокопроизводительных систем.	2	2
8		Внутренний параллелизм современных процессоров	Внутренний параллелизм современных процессоров, скалярная и суперскалярная архитектуры, конвейер команд. Многоядерные процессоры. Модели взаимодействия с памятью UMA и NUMA. Перспективы наращивания числа ядер, проблема когерентности кэша.	2	2
9	III Параллельное программирование для систем с общей памятью	Разделение процессорного времени в операционных системах	Особенности создания параллельных программ для систем с общей памятью. Поддержка параллелизма на уровне операционной системы. Процессы (process)	6	6

			и потоки (threads). Создание многопоточных программ с использованием базовых средств операционных систем.		
10		Проблемы синхронизации потоков в системах с общей памятью	Синхронизация потоков и детерминированность результатов работы программы. Локальные и общие переменные потоков, безопасный доступ к общим переменным. Побочные эффекты, реентерабельность процедур. Избыточная синхронизации потоков, тупики.	6	6
11		Технология OpenMP	Распараллеливание программ с использованием технологии OpenMP. Использование высокоуровневых библиотек и параллельных языков программирования. Автоматическое распараллеливание программ. Отладка параллельных программ.	6	6
12		Теоретические основы параллельных алгоритмов	Понятия загруженности, производительности и ускорения. Информационная зависимость операций, графы исполнения. Достаточные условия Бернштейна. Распараллеливание циклов с информационными зависимостями.	6	6
13	IV Параллельное программирование для систем с распределенной памятью	Программное обеспечение суперкомпьютерного кластера	Программы для администрирования кластера и решения прикладных задач. Системы управления очередями задач (PBS, SLURM).	6	6
14		Основы технологии MPI	Классификация функций MPI и основные понятия. Компиляция и запуск программ. Функции двухточечного обмена сообщениями.	6	6
15		Функции коллективного обмена	Функции коллективного обмена сообщениями. Односторонняя и двухсторонняя модели	6	6



		сообщениями в MPI	обмена сообщениями. Дополнительные возможности стандарта MPI-2.		
16	V Оптимизация и распараллеливание в задачах молекулярного моделирования	Оптимизация расчета взаимодействия частиц	Списки ближайших соседей (списки Верле), связанные списки частиц в ячейках. Оптимизация для дальнедействующих потенциалов: TreeMD, PPPM.	6	6
17		Параллельные алгоритмы в молекулярном моделировании	Декомпозиция по частицам и по пространству. Оптимизация передачи данных. Эффективность распараллеливания, влияние топологии кластера.	6	6
18		Применение графических ускорителей для задач молекулярного моделирования	Архитектура ГУ, организация памяти и избежание задержек, связанных с обращением к памяти. Средства разработки программ для ГУ. Кластеры на основе гибридных систем, включающих ГУ. Эффективность применения ГУ для задач молекулярного моделирования.	6	4
ВСЕГО (часов)				90	90

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

### Тестовые задания

№ п/п	Вопрос	Варианты ответа	Верный вариант ответа
1	Какое общее требование предъявляется к потенциалу взаимодействия?	а) потенциальная функция должна быть гладкой б) потенциал должен стремиться к нулю на малых расстояниях в) потенциальная функция должна иметь минимум	а) потенциальная функция должна быть гладкой
2	Что обуславливает выбор шага интегрирования в МД?	а) требуемая точность сохранения импульса	б) требуемая точность сохранения полной энергии

		б) требуемая точность сохранения полной энергии в) характер распараллеливания	
3	Какова область его применения потенциала Леннарда-Джонса?	а) кристаллы б) неидеальная плазма в) неидеальные газы и жидкости	в) неидеальные газы и жидкости
4	Какова область применения потенциала погруженного атома?	в) плотные газы б) диэлектрики в) металлы	в) металлы
5	Каковы оптимальные граничные условия для расчета уравнения состояния однородной леннард-джонсоновской жидкости?	а) метод ближайшего образа б) метод Эвальда в) граничные условия не требуются	а) метод ближайшего образа
6	В чем заключается трудность моделирования систем с кулоновским взаимодействием?	а) требуется большое число частиц в) медленное затухание потенциала на больших расстояниях б) плохо сохраняется полная энергия	б) медленное затухание потенциала на больших расстояниях
7	На чем основан термостат Ланжевена?	а) на случайных источниках и силе вязкого трения б) на рескейлинге скоростей на каждом шаге по времени в) на введении дополнительной степени свободы – коэффициента вязкого трения	а) на случайных источниках и силе вязкого трения
8	Какая рассчитываемая термодинамическая величина влияет на принятие новой конфигурации в алгоритме Метрополиса?	а) давление б) потенциальная энергия в) кинетическая энергия	б) потенциальная энергия
9	Какой метод оптимизации применяется для короткодействующих потенциалов?	а) метод TreeMD б) метод PPPM в) метод списков Верле	в) метод списков Верле
10	К какому типу относится распараллеливание расчета межчастичных взаимодействий в молекулярном моделировании?	а) распараллеливание по данным б) распараллеливание по задачам а) распараллеливание по задачам и по данным	а) распараллеливание по данным
11	Какой из объектов синхронизации применяется	а) семафор б) взаимное исключение	б) взаимное исключение

	для защиты глобального счетчика в многопоточной программе?	в) событие	
12	Какой метод распараллеливания на кластере наиболее эффективен для короткодействующих потенциалов?	а) декомпозиция по пространству б) декомпозиция по частицам в) параллельный расчет взаимодействий и решение уравнений движения	а) декомпозиция по пространству
13	В каких случаях потоки используют общую память?	а) никогда б) если они получены в результате нескольких запусков одного и того же приложения в) если они принадлежат одному и тому же процессу	в) если они принадлежат одному и тому же процессу
14	Какой тип зависимости содержит последовательность операторов: $x = a + 2*b;$ $y = x/c;$	а) истинная б) по выходным данным в) антизависимость	а) истинная
15	Какой тип зависимости содержит последовательность операторов: $x = a + 2*b;$ $x = y/c;$	а) истинная б) по выходным данным в) антизависимость	б) по выходным данным
16	Какой тип зависимости содержит последовательность операторов: $x = a + 2*b;$ $a = y/c;$	а) истинная б) по выходным данным в) антизависимость	в) антизависимость
17	Чем отличаются графические процессоры от универсальных?	а) большим объемом кэш-памяти б) расширенным набором команд в) большим числом процессорных ядер	в) большим числом процессорных ядер
18	Сколько потоков по умолчанию формируется в параллельной секции программы на OpenMP?	а) один поток б) число потоков рано числу процессорных ядер в системе в) число потоков рано числу итераций цикла	б) число потоков рано числу процессорных ядер в системе
19	Какая функция в MPI реализует неблокирующий прием сообщения?	а) MPI_Recv б) MPI_Irecv в) MPI_Recv_init	б) MPI_Irecv
20	Для чего используется динамическое (циклическое) распараллеливание?	а) для более эффективной загрузки процессорных ядер	а) для более эффективной загрузки процессорных ядер

		б) для увеличения числа используемых потоков в) для решения проблемы синхронизации потоков	
--	--	---	--

**Перечень контрольных вопросов для сдачи дифференцированного зачета:**

1. Численное интегрирование уравнений движения частиц в молекулярно-динамической (МД) системе с применением разностных схем Эйлера и Верле (Leap-Frog).

Ответ: см. раздел 3.2 в п. 1 списка основной литературы.

2. Выбор шага интегрирования и оптимальной разностной схемы. Точность сохранения полной энергии и импульса при моделировании изолированной системы.

Ответ: см. раздел 2.4 в п. 1 списка основной литературы.

3. Парные потенциалы взаимодействия, формула для расчета сил взаимодействия между частицами. Затухание потенциала на больших расстояниях. Потенциал Леннарда-Джонса.

Ответ: см. раздел 3.3 в п. 1 списка основной литературы.

4. Применение методов МД моделирования в биофизике и физике полимеров. Потенциалы для макромолекул с фиксированными химическими связями (forcefields). Многочастичные потенциалы Tersoff и EAM.

Ответ: см. раздел 9.2 в п. 1 списка основной литературы.

5. Граничные условия для МД ячейки. Метод ближайшего образа. Критерии выбора числа частиц.

Ответ: см. раздел 3.4 в п. 1 списка основной литературы.

6. Особенности расчета систем с кулоновским взаимодействием. Моделирование электролитов и неидеальной плазмы.

Ответ: см. раздел 13.1 в п. 1 списка основной литературы.

7. Схема МД эксперимента. Как задать начальное состояние системы? Вывод МД системы на равновесие, использование термостатов.

Ответ: см. раздел 3.5 в п. 1 списка основной литературы.

8. Моделирование неравновесных систем и релаксационных процессов. Роль усреднения по траекториям.

Ответ: см. раздел 7.1 в п. 1 списка основной литературы.

9. Оптимизация расчета взаимодействий между частицами. Списки ближайших соседей (списки Верле) и метод связанных списков (linkedcells).

Ответ: см. раздел 3.7 в п. 1 списка основной литературы.

10. Классификация вычислительных систем, таксономия Флинна. Примеры систем различного типа. Параллельные алгоритмы: распараллеливание по задачам и по данным.

Ответ: см. раздел 3.7 в п. 1 списка основной литературы.

11. Параллельные системы с общей памятью (SMP): ограничение на количество процессоров, проблема когерентности кэша.

Ответ: см. раздел 13.1 в п. 2 списка основной литературы.

12. Потоки (threads) и процессы (process) в многозадачных операционных системах. Различия в использовании потоков и процессов.

Ответ: см. раздел 13.1 в п. 2 списка основной литературы.

13. Создание потоков с использованием POSIXThreads, передача входных и выходных данных потоков.

Ответ: см. раздел 15.11 в п. 2 списка основной литературы.

14. Синхронизация потоков. Примеры ошибок, связанных с отсутствием синхронизации. Объекты синхронизации POSIXThreads: взаимное исключение (mutex), условная переменная (condvar).

Ответ: см. разделы 15.2-15.12 в п. 2 списка основной литературы.

15. Принцип создания программ с использованием OpenMP. Общие и локальные переменные потоков. Директивы распараллеливания.

Ответ: см. разделы 8.2-8.5 в п. 2 списка основной литературы.

16. Блочное и циклическое распараллеливание циклов. Алгоритмы распределения работы по потокам в OpenMP, директивы ompfor, ompsections и omptask.

Ответ: см. разделы 8.6-8.10 в п. 2 списка основной литературы.

17. Параллельные системы с распределенной памятью (кластеры). Отличие методов параллельного программирования для систем с общей и распределенной памятью.

Ответ: см. раздел 16.1-16.2 в п. 2 списка основной литературы.

18. Общая схема программы с использованием библиотеки MPI. Компиляция и запуск MPI-программ.

Ответ: см. разделы 9.1-9.2 в п. 2 списка основной литературы.

19. Функции передачи сообщений между двумя процессами в MPI. Классификация функций по способу синхронизации. Блокирующие и неблокирующие функции приема-передачи в MPI.

Ответ: см. раздел 9.2 в п. 2 списка основной литературы.

20. Способы передачи разнородных данных в одном сообщении в MPI. Функции коллективного обмена сообщениями в MPI. Односторонние коммуникации в стандарте MPI-2.

Ответ: см. разделы 9.4-9.5 в п. 2 списка основной литературы.

21. Распараллеливание расчета взаимодействий между частицами в МД моделировании: декомпозиция по пространству и по частицам. Эффективность распараллеливания на кластерах с различной топологией коммуникационной сети.

Ответ: см. разделы 17.2-17.5 в п. 1 списка основной литературы.

### Перечень задач для сдачи дифференцированного зачета и экзамена:

1. Написать параллельную версию цикла с использованием директив OpenMP:

```
for(int i=0; i<n-1; ++i) {
    a[i] = f(i);
    b[i] = a[i+1]*a[i+1];
}
```

Решение:

```
a[0] = f(0); b[n-2] = a[n-1]*a[n-1];
#pragma omp parallel for
for(int i=1; i<n-1; ++i) {
    b[i-1] = a[i]*a[i];
    a[i] = f(i);
}
```

2. Написать параллельную версию цикла с использованием директив OpenMP:

```

for(int i=1; i<n; ++i) {
    a[i] = f(i);
    b[i] = a[i-1]*b[i];
}

```

Решение:

```

a[n] = f(n);
#pragma omp parallel for
for(int i=1; i<n-1; ++i) {
    a[i] = f(i);
    b[i+1] = a[i]*b[i+1];
}
b[1] = a[0]*a[0];

```

3. Написать параллельную версию цикла с использованием директив OpenMP:

```

for(int i=4; i<n; ++i)
a[i] = f(a[i-4]);

```

Решение:

```

#pragma omp parallel for
for(int i=4; i<n; i+=4)
for(int j=0; j<4; ++j)
a[i+j] = f(a[i+j-4]);

```

4. Написать параллельную версию цикла с использованием директив OpenMP:

```

s = 0;
for(int i=0; i<n-1; ++i)
    s += a[i]*a[i+1];

```

Решение:

```

#pragma omp parallel forreduction(+:s)
s = 0;
for(int i=0; i<n-1; ++i)
    s += a[i]*a[i+1];

```

5. Написать параллельную версию цикла с использованием директив OpenMP:

```

for(int i=0; i<n-1; ++i)
a[i] = f(a[i+1]);

```

Решение:

```

for(int i=0; i<n-1; ++i) b[i] = a[i];
#pragma omp parallel for
for(int i=0; i<n-1; ++i)
a[i] = f(b[i+1]);

```

6. MPI-программа содержит следующие определения и вызовы функций:

```

MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
double data = (rank == 0) ? 1.234 : 0;

```

Написать фрагмент программы, в которой когда каждый процесс с  $\text{rank} > 0$  ожидает данные (data) от процесса  $\text{rank} - 1$ , а затем передает их процессу  $\text{rank} + 1$ .

Решение:

```

MPI_Status stat;
if(rank > 0)
MPI_Recv(&data, 1, MPI_DOUBLE, rank-1, 0, MPI_COMM_WORLD, &stat);
if(rank < size-1)
MPI_Send(&data, 1, MPI_DOUBLE, rank+1, 0, MPI_COMM_WORLD);

```

7. MPI-программа содержит следующие определения и вызовы функций:

```

MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
double data = rank*rank;

```

Написать фрагмент программы, в которой каждый процесс с нечетным номером `rank` обменивается данными `data` процессом с номером `rank - 1` (считается, что всего запущено четное число процессов).

Решение:

```
MPI_Status stat;
MPI_Send(&data, 1, MPI_DOUBLE,
rank%2?rank - 1 : rank+1, 0, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Recv(&data, 1, MPI_DOUBLE,
rank%2 ? rank - 1 : rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD, &stat);
```

8. MPI-программа содержит следующие определения и вызовы функций:

```
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
double data = rank*rank;
```

Написать фрагмент программы, в которой каждый процесс с нечетным номером `rank` передает данные `data` процессу с номером `rank - 1` (считается, что всего запущено четное число процессов).

Решение:

```
MPI_Status stat;
if(rank % 2)
MPI_Send(&data, 1, MPI_DOUBLE, rank - 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
else
MPI_Recv(&data, 1, MPI_DOUBLE, rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD, &stat);
```

9. MPI-программа содержит следующие определения и вызовы функций:

```
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
double data = rank*rank;
```

Написать фрагмент программы, в которой каждый процесс с номером `rank` передает данные (`data`) процессу с номером `rank + 1`, а процесс с номером `size - 1` передает данные процессу с номером 0.

Решение:

```
MPI_Status stat;
MPI_Send(&data2, 1, MPI_DOUBLE,
rank < size-1 ? rank+1 : 0, 0, MPI_COMM_WORLD);
MPI_Recv(&data2, 1, MPI_DOUBLE,
rank > 0 ? rank-1 : size-1, 0, MPI_COMM_WORLD, &stat);
```

10. Написать параллельную версию цикла с использованием библиотеки MPI:

```
double s = 0;
for(int i=0; i<n; ++i) s += f(i);
```

После выполнения программы переменная `s` должна иметь результат вычислений в процессе с `rank = 0`. Считается, что `n` делится нацело на `size`.

Решение:

```
MPI_Status stat;
double s, s1 = 0;
for(int i=rank*(n/size); i<(rank+1)*(n/size); ++i) s1 += f(i);
MPI_Reduce(&s1, &s, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);
```

## 9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:

Компьютер и мультимедийное оборудование (проектор), учебный суперкомпьютерный кластер с удаленным доступом.

## 10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Основная литература:

1. С.Г. Лисицын. Компьютерное моделирование задач молекулярной физики. – Догорудный: Интеллект, 2019. – 142 с.
2. Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин Основы моделирования молекулярной динамики: учебное пособие. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2018. – 106 с.
3. Р. Роберт, З. Джулиана. Параллельные и высокопроизводительные вычисления. – М.: ДМК Пресс, 2022. – 800 с.
4. А.А. Малявко. Параллельное программирование на основе технологий OpenMP, CUDA, OpenCL, MPI. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Юрайт, 2022. – 136 с.
5. С.А. Лупин, М.А. Посыпкин. Технологии параллельного программирования: учебное пособие. – М.: Форум, 2020. – 206 с.
6. В.П. Гергель, А.В. Сысоев. Высокопроизводительные параллельные вычисления: 100 заданий для расширенного лабораторного практикума. – М.: Физматлит, 2018. – 248 с.
7. С.В. Борзунов, С.Д. Кургалин, А.В. Флегель. Практикум по параллельному программированию. – С.-Петербург: БХВ-Петербург, 2017. – 236 с.

### Дополнительная литература:

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика в 10 т. – 6-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2021. – Т. 5. Статистическая физика, Ч.1. – 620 с.

### Электронные ресурсы, включая доступ к базам данных и т.д.:

1. Сайт Лаборатории параллельных информационных технологий НИВЦ МГУ, URL: <http://parallel.ru>
2. Официальная документация по MPI: <https://www.mpi-forum.org/docs/> (на англ. языке)
3. Официальная документация по OpenMP: <http://www.openmp.org> (на англ. языке)
4. Официальный сайт Nvidia CUDA, URL: <https://developer.nvidia.com/cuda-zone>
5. Официальная страница проекта LAMMPS, URL: <http://lammps.sandia.gov> (на англ. языке)

### Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

Для удаленного доступа к учебному вычислительному кластеру используются программы PuTTY (<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>) и WinSCP (<http://winscp.net/>). Также в процессе выполнения практических заданий студенты используют пакет программ молекулярно-динамического моделирования LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>). На вычислительном кластере должны быть установлены: ОС Linux, компилятор GNUCCompiler, библиотека OpenMPI, систем очередей заданий PBS/SLURM. Указанные программы являются свободно распространяемыми и не требуют приобретения лицензии.

### 11. Язык преподавания – русский.

Программу составил:  Морозов И.В., к.ф.-м.н., доцент

«14» июня 2022г.