

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Проректор по учебной работе и  
довузовской подготовке**

**А.А. Воронов**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Технологии суперкомпьютерных вычислений
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика и педагогика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра информатики и вычислительной математики
<b>курс:</b>	2
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 4 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 0 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 60 час.

Самостоятельная работа: 120 час.

Всего часов: 180, всего зач. ед.: 4

Количество контрольных работ, заданий: 4

Программу составили:

И.Д. Федоров

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры информатики и вычислительной математики 06.02.2020

## Аннотация

Курс направлен на формирование у студентов базовых навыков по оптимизации и автоматизации работы на компьютерах, включающих в себя удаленную работу на суперкомпьютерах, возможность удаленной обработки полученных результатов и их визуализацию, а также возможность удобного представления этих данных за пределами своей рабочей среды.

После успешного прохождения курса студенты смогут:

- Эффективно использовать сетевой протокол ssh, а также с его помощью обрабатывать удаленные данные в среде python.
- Вести весь журнал своих данных средствами git.
- Работать в системе очередей Slurm и уметь максимизировать эффективность использования суперкомпьютера при необходимости проведения длительных расчетов.
- Работать в интерактивной оболочке Jupyter Lab, выполняя расчеты на удаленной машине.
- Создавать комплексные визуализации физических процессов на основе молекулярно-динамических моделей с использованием следующих программ: VMD, OVITO, Pymol.

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Формирование базовых знаний по работе на суперкомпьютерах для дальнейшего использования при решении задачи математического моделирования и обработки данных; формирование информационной культуры и способности применять технологии суперкомпьютерных вычислений на практике.

### Задачи дисциплины

- Формирование у обучающихся базовых знаний по удаленной работе на суперкомпьютерах;
- формирование навыков работы с системами очередей, применяемых на суперкомпьютерах;
- формирование умений и навыков для анализа и визуального представления результатов решения задач математического моделирования и обработки данных.

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.4 Грамотно, логично, аргументированно формирует собственные суждения и оценки
	УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности

программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.2 Знает основные источники научно-технической и (или) технологической информации в области профессиональной деятельности
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
	ОПК-5.3 Способен к профессиональной эксплуатации современной экспериментальной научно-исследовательской (измерительно-аналитической и технологической) аппаратуры
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.6 Знает основные правила поведения и работы в современной научной лаборатории
	ПК-1.7 Способен оценивать требуемые ресурсы (материальные и временные) для планирования и проведения научного эксперимента
ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- Принципы работы в bash;
- принципы организации удаленного доступа к вычислительным системам; теорию принципов работы систем управления версиями;
- принципы работы с системами очередей;
- способы обработки информации стандартными пакетами.

уметь:

- Максимально ускорять скорость получения результатов в рамках существующие ограничения системы очередей;
- работать в основных пакетах python по анализу и обработке данных;
- визуализировать различные графики в интерактивном формате;
- визуализировать молекулярные системы с использование различных пакетов.

владеть:

- Одним или несколькими способами автоматической обработки и визуализации данных полученных в результате экспериментов или теоретических расчетов.

#### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Удаленная работа в bash			12	24
2	Использование системы очередей			6	12
3	Python для работы с данными			6	12
4	Системы визуализации данных в Python			14	28
5	Системы удаленной обработки данных			6	12
6	Использование пакетов визуализации молекулярных систем			16	32
Итого часов				60	120
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		180 час., 4 зач.ед.			

##### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 4 (Весенний)

###### 1. Удаленная работа в bash

Введение в bash. Изучение стандартных команд: awk, grep, find, tail, head, sed. Введение в ssh, scp, rsync. Настраиваем ключи, используем config файл, пробрасываем прокси. Поднимаем свой ssh сервер. Использование ssh в python (Paramiko), создаем класс по взаимодействию с библиотекой paramiko.

###### 2. Использование системы очередей

Введение в Slurm. Принцип работы. Наиболее используемые команды и их аргументы. Команда at для bash.

###### 3. Python для работы с данными

Введение в основные используемые библиотеки: pandas, numpy, Matplotlib, scipy.

###### 4. Системы визуализации данных в Python

Введение в среду Jupyter notebook (Jupyter Lab). Настройка визуализации. Изучаем пакет Plotly для интерактивной визуализации графиков и пакет Ngview для 3-х мерной визуализации частиц внутри jupyter notebook (lab).

#### 5. Системы удаленной обработки данных

Визуализация системы в VMD. Введение в язык tk, используемый для автоматизации VMD. Визуализация системы в ovito. Изучение команд в python.

#### 6. Использование пакетов визуализации молекулярных систем

Визуализация системы в Rmol. Изучение основных команд и создание своих инструментов в нем.

### **5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Компьютерный класс с доской, проектором или телевизором, подключенным к сети.

### **6.Перечень рекомендуемой литературы**

#### Основная литература

1. Программирование на Python 3 : Подробное руководство [Текст] = Programming in Python 3 : [учеб. пособие для вузов] / М. Саммерфилд; пер. с англ. А. Киселева .— СПб : Символ-Плюс, 2015 .— 608 с.

#### Дополнительная литература

1. Hands-on data structures and algorithms with Python, Write complex and powerful code using the latest features of Python 3.7 /B. Agarwal, B. Baka. Birmingham ; Mumbai, Packt, 2018

### **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

1. [github.com/paramiko/paramiko](https://github.com/paramiko/paramiko)
2. [github.com](https://github.com)
3. [bitbucket.com](https://bitbucket.com)
4. [gitlab.com](https://gitlab.com)
5. [pandas.pydata.org](https://pandas.pydata.org)
6. [matplotlib.org](https://matplotlib.org)
7. [numpy.org](https://numpy.org)
8. [scipy.org](https://scipy.org)
9. [jupyter.org](https://jupyter.org)
10. [plot.ly](https://plot.ly)
11. [nglviewer.org](https://nglviewer.org)
12. [gnuplot.info](https://gnuplot.info)
13. [ks.uiuc.edu/Research/vmd](https://ks.uiuc.edu/Research/vmd)
14. [ovito.org](https://ovito.org)
15. [pymol.org](https://pymol.org)

### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

На занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. В процессе самостоятельной работы обучающихся возможно использование любые среды программирования.

## 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий курс, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой. Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы,
- проработку учебного материала (учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях
- подготовку к дифференцированному зачёту.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций.

Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо решать как можно больше задач. При решении задач каждое действие необходимо аргументировать, ссылаясь на известные теоретические сведения.

В начале занятия, как правило, проводится короткий (10-15 минут) опрос по материалу прошедших занятий в устной или письменной форме. Обычно придерживаются следующей схемы: изучение материала по конспекту в тот же день (10-15 минут); повторение материала накануне следующего занятия (10-15 минут), проработка учебного материала по конспектам, учебной и научной литературе, подготовка ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения (1 час неделю), подготовка к практическому занятию, решение задач (1 час). Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю, ведущему лабораторные занятия. Обязательным требованием является выполнение домашних работ, которые систематически сдаются на проверку.

Промежуточный контроль знаний проводится в виде контрольных работ, на которых студенту предлагается решить несколько задач, а также студенту в ходе освоения курса необходимо выполнить две домашние индивидуальные работы с их последующей защитой.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

**по направлению:** Прикладные математика и физика  
**профиль подготовки:** Физика и педагогика  
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау  
кафедра информатики и вычислительной математики  
**курс:** 2  
**квалификация:** бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 4 (весенний) - Дифференцированный зачет

**Разработчики:**

И.Д. Федоров

В.В. Стегайлов, д-р физ.-мат. наук, доцент, доцент

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
	УК-1.4 Грамотно, логично, аргументированно формирует собственные суждения и оценки
	УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи
ОПК-1 Способен применять фундаментальные знания, полученные в области физико-математических и (или) естественных наук, и использовать их в профессиональной деятельности	ОПК-1.1 Способен анализировать поставленную задачу, намечать пути ее решения
	ОПК-1.2 Способен строить математические модели, производить количественные расчеты и оценки
	ОПК-1.3 Способен определять границы применимости полученных результатов
ОПК-2 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	ОПК-2.1 Способен применять современные вычислительную технику и сервисы сети Интернет в области (сфере) профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Знает и умеет применять численные математические методы и прикладное программное обеспечение для решения научных задач в профессиональной области
ОПК-4 Способен осуществлять сбор и обработку научно-технической и (или) технологической информации для решения фундаментальных и прикладных задач	ОПК-4.1 Владеет методами научного поиска и интеллектуального анализа информации при решении задач профессиональной деятельности
	ОПК-4.2 Знает основные источники научно-технической и (или) технологической информации в области профессиональной деятельности
ОПК-5 Способен участвовать в проведении фундаментальных и прикладных исследований и разработок, самостоятельно осваивать новые теоретические, в том числе, математические методы исследований, и работать на современной экспериментальной научно-исследовательской, измерительно-аналитической и технологической аппаратуре	ОПК-5.1 Способен решать поставленные задачи в области теоретических и экспериментальных исследований и разработок
	ОПК-5.2 Обладает способностью к освоению новых знаний на основе изучения литературы, научных статей и других источников
	ОПК-5.3 Способен к профессиональной эксплуатации современной экспериментальной научно-исследовательской (измерительно-аналитической и технологической) аппаратуры
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.4 Умеет строить математические модели для описания и исследования процессов и явлений в соответствующих научных областях
	ПК-1.8 Владеет навыками работы с современными языками программирования и программными пакетами для научных расчетов
	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
	ПК-1.6 Знает основные правила поведения и работы в современной научной лаборатории
	ПК-1.7 Способен оценивать требуемые ресурсы (материальные и временные) для планирования и проведения научного эксперимента



ПК-2 Способен анализировать полученные в ходе научно-исследовательской работы данные и делать научные выводы (заключения)	ПК-2.1 Владеет методами статистической обработки и анализа научных данных
	ПК-2.2 Умеет находить ключевые параметры, определяющие изучаемое явление, и производить численные оценки по порядку величины
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Технологии суперкомпьютерных вычислений» обучающийся должен:

### знать:

- Принципы работы в bash;
- принципы организации удаленного доступа к вычислительным системам; теорию принципов работы систем управления версиями;
- принципы работы с системами очередей;
- способы обработки информации стандартными пакетами.

### уметь:

- Максимально ускорять скорость получения результатов в рамках существующие ограничения системы очередей;
- работать в основных пакетах python по анализу и обработке данных;
- визуализировать различные графики в интерактивном формате;
- визуализировать молекулярные системы с использованием различных пакетов.

### владеть:

- Одним или несколькими способами автоматической обработки и визуализации данных полученных в результате экспериментов или теоретических расчетов.

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры вопросов для текущего контроля:

- 1) Для каких задач следует использовать систему контроля версий git, в чем ее преимущество, приведите пример проекта?
- 2) Если в системе очередей slurm ограничение по времени на сутки, при этом ваша программа поддерживает запуск из restart файла, можно ли сделать «бесконечный» расчет без использования дополнительных скриптов?
- 3) Возможно ли выполнить исследование и запуск молекулярного моделирования используя лишь оболочку Jupyter Notebook? Если да, то какие пакеты вы бы использовали?
- 4) Как просто создать веб-страницу с текущими результатами расчетов, с возможностью их просмотра и доступа по паролю?
- 5) На удаленной машине в системе Slurm выполняется одна задача, через день она автоматически завершится по истечению выделенного времени, либо завершиться заранее. Вам необходимо запустить еще одну задачу, при этом она использует результат первой. Вас не будет на связи около недели, перечислите максимальное количество способов запустить следующую задачу с минимальным простоем удаленной машины.

## 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется в форме дифференцированного зачёта.

1. Написать скрипт для запуска набора программ с перебором входных данных.
2. Написать проверку, выполнялась ли задача на сервере и как выполнялась.
3. Поместить весь курс в репозиторий github. Оформить его.
4. Используя `stop` и `bash` разработать свою систему очередей, позволяющую обходить стандартные ограничения сервера на количество задач в очереди и позволяющую загружать задачи на несколько партиций, в зависимости от их загруженности
5. Написать скрипт на `python`, обрабатывающий выданный набор данных по молекулярной динамике и выводящий из него набор графиков (MSD, RDF, Temperature) в формате `png`.
6. Реализовать предыдущую задачу внутри `jupyter notebook`, оформить все данные используя `Markdown`, добавить возможность просматривать динамику системы.
7. Реализовать предыдущую задачу с результатами на отдельной веб странице.
8. Настроить сервер на удаленной машине, открыть к нему доступ извне с аутентификацией и возможность просмотра расчетных данных в виде веб страницы.
9. Визуализировать в 3D набор данных, анимировать его по времени
  - 9.1. используя средства `gnuplot`,
  - 9.2. используя средства `VMD`,
  - 9.3. используя средства `Ovito`,
  - 9.4. используя средства `Pymol`.

#### Критерии оценивания

- 10 - Выставляется студенту, успешно защитившему все необходимые проекты, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, своевременно и грамотно выполнившему все домашние задания.
- 9 - Выставляется студенту, успешно защитившему подавляющее большинство проектов, показавшему глубокие знания учебной программы дисциплины, своевременно и грамотно выполнившему все домашние задания.
- 8 - Выставляется студенту, успешно защитившему проекты, показавшему хорошие знания учебной программы дисциплины, выполнившему домашние задания.
- 7 - Выставляется студенту, защитившему проекты, если он твердо знает материал и по существу излагает его, грамотно и своевременно выполнил большую часть домашних заданий.
- 6 - Выставляется студенту, защитившему проекты, если он твердо знает материал и по существу излагает его, грамотно выполнил большую часть домашних заданий.
- 5 - Выставляется студенту, защитившему проекты, если он твердо знает материал и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, выполнил большую часть домашних заданий, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.
- 4 - Выставляется студенту, не защитившему проекты, если он даёт правильные формулировки базовых понятий и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.
- 3 - Выставляется студенту, не защитившему проекты, если он даёт недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.
- 2 - Выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины и не умеет использовать полученные знания при решении типовых практических задач.
- 1 - Выставляется студенту, который не способен сформулировать основные понятия дисциплины и не умеет использовать полученные знания при решении типовых практических задач.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Дифференцированный зачет проводится по итогам текущей успеваемости и сдачи домашних заданий, предусмотренных программой дисциплины, путем организации специального опроса, проводимого в устной или письменной форме. Защита одного или нескольких проектов в зависимости от сложности происходит индивидуально в течение семестра.