Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki

Karta przedmiotu

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2015/2016

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki

Kierunek studiów: Informatyka

Profil: Ogólnoakademicki

Forma sudiów: stacjonarne

Kod kierunku: I

Stopień studiów: II

Specjalności: Teleinformatyka dla licencjatów

1 Informacje o przedmiocie

Nazwa przedmiotu	Symulacja komputerowa
Nazwa przedmiotu w języku angielskim	Computer simulations
Kod przedmiotu	WFMiI I oIIS D4 15/16
Kategoria przedmiotu	Przedmioty specjalnościowe
Liczba punktów ECTS	6.00
Semestry	3

2 Rodzaj zajęć, liczba godzin w planie studiów

Semestr	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Laboratorium komputerowe	Seminarium	Projekt
3	30	0	0	0	0	30

3 Cele przedmiotu

Cel 1 Wprowadzenie podstawowych pojęć związanych z przetwarzaniem danych algorytmami BLAS (Basis Linear Algebra Subroutines) dla macierzy rzadkich

Cel 2 Zapoznanie studentów z technikami wektoryzowania obliczeń (SSE2, Advanced Vector Extensions, FMA3), optymalizacją potokowego przetwarzania danych oraz z zrównolegleniem wielowątkowym w architekturze SMP (Symmetric Multiprocessing).

Cel 3 Wprowadzenie podstawowych pojęć związanych z technikami macierzy rzadkich: graf przyległości, struktura poziomów, wierzchołek peryferyjny, formaty skompresowane. Rozwiązywanie układów równań liniowych algebraicznych z macierzami rzadkimi symetrycznymi solwerami bezpośrednimi, algorytmy uporządkowania i metody faktoryzacji.

Cel 4 Zapoznanie studentów z metodom gradientów sprzężonych z uwarunkowaniem wstępnym. Stosowanie funkcjonału energii jako funkcje celu w metodach optymalizacji. Pojęcia o współczynniku uwarunkowania macierzy oraz jego wpływu na zbieżność metody iteracyjnej. Zasady konstruowania uwarunkowania wstępnego.

4 Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i innych kompetencji

1 Podstawowa wiedza z algebry liniowej, analizy matematycznej, teorii grafów, systemów operacyjnych, metod numerycznych.

5 Efekty kształcenia

EK1 Wiedza Znajomość podstaw tworzenia algorytmów biblioteki BLAS dla macierzy gęstych.

EK2 Umiejętności Student potrafi w zastosować podstawowe techniki programowania wykorzystane w algorytmach BLAS przy tworzeniu własnego oprogramowania.

EK3 Wiedza Znajomość z technikami zrównoleglenia wielowątkowego.

EK4 Umiejętności Student potrafi wykorzystać praktycznie techniki zrównoleglenia wielowątkowego przy tworzeniu własnego oprogramowania.

EK5 Wiedza Znajomość z podstawami technik macierzy rzadkich.

EK6 Wiedza Student potrafi używać formaty skompresowane oraz stosować algorytmy operujące nad macierzami rzadkimi z bibliotek BLAS przy tworzeniu własnego oprogramowania.

6 Treści programowe

Projekt		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
P1	Algorytm mnożenia macierzy przez wektor y = A*x. Optymalizacja odczytu stron pamięci RAM, techniki wspierania potokowego przetwarzania danych.	2
P2	Wektoryzowanie obliczeń na przykładzie algorytmu y = A*x. Stosowanie technik SSE2.	2
P3	Zrównoleglenie algorytmu naiwnego C = A*B (A, B, C - macierzy gęste) za pomocą OpenMP.	2
P4	Algorytm mnożenia macierzy przez macierz C = A*B. Wersji naiwna, naiwna zoptymalizowana, blokowa (blokowanie pamięci podręcznej), blokowa (blokowanie pamięci podręcznej oraz rejestrów) oraz wersja algorytmu, wykonana w technice Intel MKL.	4

Projekt		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
P5	Algorytm obliczenia iloczynu skalarnego dwóch wektorów w trybie wielowątkowym. Zrównoleglenie na podstawie funkcji biblioteki wielowątkowej SDK OS Windows. Lokalne dane wątku. Zabezpieczenie spójności danych w pamięci podręcznej procesorów. Wektoryzowanie obliczeń i potokowe przetwarzanie danych.	4
P6	Zrównoleglenie algorytmu mnożenia macierzy przez macierz w trybie wielowątkowym. Planowanie podziału danych pomiędzy wątkami.	2
P7	Numeryczne obliczenie całki w trybie wielowatkowym.	4
P8	Formaty skompresowane dla macierzy rzadkich.	2
P9	Algorytm mnożenia macierzy rzadkiej symetrycznej przez wektor	2
P10	Metody uporządkowania ND i MDA. Tworzenie faktor-grafu na podstawie faktoryzacji symbolicznej.	2
P11	Faktoryzacja macierzy rzadkiej symetrycznej metodą Choleskiego looking left oraz metodą wielofrontalną.	4

Wykład		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W1	Typowe zadania symulacji komputerowych w zadaniach technicznych. Miary wydajności w algorytmach obliczeniowych. Architektura SMP. Koherentność danych w pamięci podręcznej procesorów. Przetwarzanie potokowe. Rozwijanie pętli i pobieranie danych z wyprzedzeniem.	2
W2	Hierarchia pamięci. Typowe algorytmy BLAS i ich przeanalizowanie. Wskaźnik wydajności pamięci szybkiej. Algorytmy y = y +a*x, y = y +A*x, C = A*B, gdzie a - skalar, x, y - wektory, A, B, C - macierzy.	2
W3	Algorytm mnożenia macierzy przez macierz C = A*B. Blokowanie pamięci podręcznej, blokowanie rejestrów, wektoryzowanie obliczeń, przepakowanie danych, optymalizacja potokowego przetwarzania danych. Techniki, stosowane przez Intel w bibliotece MKL.	2
W4	Faktoryzacje macierzy gęstych A = L*U, A = L*Lt. Podstawienia bezpośrednie i wsteczne - procedura "triangular solution". Blokowa faktoryzacja, obliczenie uzupełnienie Schura.	2
W5	Optymalizacja kodu a opcje kompilatora. Superskalarność procesora a potokowość przetwarzania danych. Zmiana kolejności obliczeń poprzez kompilator optymalizacyjny i możliwe efekty uboczne.	2
W6	Oprogramowanie równolegle w architekturze SMP. Sterowanie wątkami w OS Windows.	2

Wykład		
Lp	Tematyka zajęć Opis szczegółowy bloków tematycznych	Liczba godzin
W7	Modele oprogramowania wielowątkowego, zrównoleglenie danych, prawo Amdahl'a, pojęcia "load balance", "granularity". Równolegle alokowanie pamięci, "Thread local Storage" (TLS).	2
W8	Osobliwości zrównoleglenia na komputerach wielordzeniowych na przykładach zadań dot = xt*y, y = A*x, C = A*B, A*x = b -> x (xt - transponowanie wektora x, y - wektor, dot - skalar, A, B, C - macierzy gęste).	2
W9	Macierzy rzadkie symetryczne. Graf przyległości. Struktura poziomów. Wierzchołek peryferyjny. Formaty skompresowane.	2
W10	Rozwiązywanie układów równań liniowych algebraicznych z macierzami rzadkimi symetrycznymi metodami bezpośrednimi. Zapełnienia i metody uporządkowania. Faktoryzacja symboliczna. Algorytmy uporządkowania ND i MDA. Algorytmy hybrydowe, METIS.	3
W11	Solwery Choleskiego looking left, looking right, metoda frontalna i wielofrontalna. Solwery wielofrontalne a supernodalne w architekturze SMP. PARDISO, PARFES.	5
W12	Rozwiązanie układów równań liniowych algebraicznych z macierzami rzadkimi za pomocą metod iteracyjnych: osobliwości zbieżności metod gradientowych, metoda gradientów sprzężonych, uwarunkowanie wstępne, niepełna faktoryzacja Choleskiego, metody wielopoziomowe.	4

7 Narzędzia dydaktyczne

N1 Wykłady

N2 Dyskusja

N3 Ćwiczenia projektowe

N6 Praca indywidualna

N7 Konsultacje

8 Obciążenie pracą studenta

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	60
Konsultacje przedmiotowe	10
Egzaminy i zaliczenia w sesji	5
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	30
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	65
Sumaryczna liczba godzin dla przedmiotu wynikająca z całego nakładu pracy studenta	**180**
Sumaryczna liczba punktów ECTS dla przedmiotu	6.00

9 Sposoby oceny

Ocena formująca

F1 Ćwiczenie praktyczne

F2 Projekt indywidualny

F4 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

F5 Odpowiedź ustna

Ocena podsumowująca

P1 Egzamin pisemny

P2 Średnia ważona ocen formujących

Warunki zaliczenia przedmiotu

W1 Koniecznośc zaliczenia wszystkich zadań laboratoryjnych i projektowych

W2 Pozytywna ocena z egzaminu

Kryteria oceny

Efekt kształcenia 1

Na ocenę 2.0	Student nie zna podstaw tworzenia algorytmów biblioteki BLAS dla macierzy gęstych.
Na ocenę 3.0	Student zna jak umieszczać w pamięci RAM macierzy gęste tak, żeby zoptymalizować transfer danych cache - RAM - cache. Student ma pojęcie o potokowym przetwarzaniu danych oraz sposobach usunięcia zaburzeń potokowego przetwarzania. Student zna czym jest wskaźnik wydajności pamięci szybkiej oraz techniki wektoryzowania SSE2 (AVX, FMA). Student ma pojęcia o algorytmach faktoryzacji macierzy gęstej, podstawieniach bezpośrednich i wstecznych oraz o blokowych metodach rozwiązania układów równań liniowych algebraicznych.
Na ocenę 3.5	Student zna wszystko z poprzedniego punktu oraz ma pojęcia o blokowaniu pamięci podręcznej.
Na ocenę 4.0	Student zna wszystko z poprzednich punktów oraz ma pojęcia o blokowaniu rejestrów procesora i przepakowaniu danych.
Na ocenę 4.5	Student zna wszystko z poprzednich punktów oraz orientuje się w schematach blokowania rejestrów XMM (YMM).
Na ocenę 5.0	Student zna wszystko z poprzednich punktów oraz umie wyprowadzić wzory dla wskaźnika wydajności pamięci szybkiej dla podstawowych algorytmów algebry liniowej, uzasadnić algorytmy rozwiązania układów równań liniowych algebraicznych metodami bezpośrednimi.
Efekt kształcenia 2	
Na ocenę 2.0	Student nie potrafi zastosować podstaw tworzenia algorytmów biblioteki BLAS dla macierzy gęstych.
Na ocenę 3.0	Student potrafi umieszczać w pamięci RAM macierzy gęste tak, żeby zoptymalizować transfer danych cache - RAM - cache. Student umie tworzyć kod programowy optymalny z punktu widzenia potokowego przetwarzania danych. Student umie stosować techniki wektoryzowania obliczeń SSE2 (AVX, FMA).
Na ocenę 4.0	Student umie wszystko z poprzednich punktów oraz potrafi na praktyce wykorzystać blokowanie pamięci cache.
Na ocenę 5.0	Student umie wszystko z poprzednich punktów oraz potrafi na praktyce wykorzystać blokowanie rejestrów procesora.
Efekt kształcenia 3	
Na ocenę 2.0	Student nie zna podstawowych technik zrównoleglenia wielowątkowego.
Na ocenę 3.0	Student zna techniki zrównoleglenia prostych pętli na podstawie OpenMP.
Na ocenę 3.5	Student zna techniki zrównoleglenia prostych pętli na podstawie OpenMP i prawo Amdahla.
Na ocenę 4.0	Student zna techniki zrównoleglenia na podstawie OpenMP i bibliotek wielowątkowych, zna prawo Amdahla.

Na ocenę 4.5	Student zna techniki zrównoleglenia na podstawie OpenMP i bibliotek wielowątkowych oraz prawo Amdahla, zna sposoby synchronizacji na podstawie sekcji krytycznych i zmiennych atomowych.
Na ocenę 5.0	Student zna techniki zrównoleglenia na podstawie OpenMP i bibliotek wielowątkowych oraz prawo Amdahla, podstawy osiągnięcia "load balance" dla algorytmu mnożenia macierzy przez wektor i uzupełnienia Schura, zna sposoby synchronizacji na podstawie sekcji krytycznych i zmiennych atomowych.
Efekt kształcenia 4	
Na ocenę 2.0	Student nie potrafi wykorzystać praktycznie techniki zrównoleglenia wielowątkowego.
Na ocenę 3.0	Student potrafi zastosować techniki zrównoleglenia prostych pętli na podstawie OpenMP.
Na ocenę 4.0	Student potrafi zastosować techniki zrównoleglenia na podstawie OpenMP i bibliotek wielowątkowych, umie na podstawie prawa Amdahla oszacować skuteczność zrównoleglenia dla podanego algorytmu.
Na ocenę 5.0	Student potrafi zastosować techniki zrównoleglenia na podstawie OpenMP i bibliotek wielowątkowych oraz prawo Amdahla i sposoby synchronizacji na podstawie sekcji krytycznych i zmiennych atomowych.
Efekt kształcenia 5	
Na ocenę 2.0	Student nie zna podstaw teorii macierzy rzadkich.
Na ocenę 3.0	Student zna formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA oraz faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose.
Na ocenę 4.0	Student zna formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA, faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose oraz podstawy faktoryzacji macierzy rzadkich.
Na ocenę 5.0	Student zna formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA, faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose oraz podstawy metody wielofrontalnej i looking left dla faktoryzacji macierzy rzadkich.
Efekt kształcenia 6	
Na ocenę 2.0	Student nie potrafi zastosować podstawy teorii macierzy rzadkich.
Na ocenę 3.0	Student potrafi zastosować formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA oraz faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose.
Na ocenę 4.0	Student potrafi zastosować formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA, faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose oraz faktoryzacje macierzy rzadkich metodą looking left.
Na ocenę 5.0	Student potrafi zastosować formaty skompresowane, algorytmy uporządkowania ND, MDA, faktoryzacje symboliczną na podstawie twierdzenia D. J. Rose oraz metody wielofrontalną i looking left dla faktoryzacji macierzy rzadkich.

10 Macierz realizacji przedmiotu

Efekt kształcenia	Odniesienie danego efektu do szczegółowych efektów zdefiniowanych dla programu	Cele przedmiotu	Treści programowe	Narzędzia dydaktyczne	Sposoby oceny
EK1	I2_W01 I2_W02	Cel 1 Cel 2	P1 P2 P3 P4 W1 W2 W3 W4	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2
EK2	I2_U05 I2_U06	Cel 1 Cel 2	P1 P2 P3 P4 W1 W2 W3 W4 W5	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2
EK3	I2_W01 I2_W02	Cel 2	P3 P5 P6 P7 W5 W6 W7 W8	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2
EK4	I2_U05 I2_U06	Cel 2	P3 P5 P6 P7 W6 W7 W8	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2
EK5	I2_W01 I2_W02	Cel 3 Cel 4	P8 P9 P10 P11 W9 W10 W11 W12	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2
EK6	I2_U06	Cel 3 Cel 4	P8 P9 P10 P11 W5 W9 W10 W11 W12	N1 N2 N3 N6 N7	F1 F2 F4 F5 P1 P2

11 Wykaz literatury

Literatura podstawowa

[1] Demmel J. W. — *Applied Numerical Linear Algebra*, Philadellphia, 1997, SIAM

[2] Golub G.H., van Loan C. F. — *Matrix Computations. Third edition*, Baltimore, London, 1996, The Johns Hopkins University Press

[3] Fialko S. — *The direct methods for solution of the linear equation sets in modern FEM software*, Moscow, 2009, SCAD Soft

[4] George A., Liu J. W.-H. — *Computer solution of sparse positive definite systems*, New Jersey, 1981, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs

[5] Dobrian F., Pothen A. — *Oblio: a sparse direct solver library for serial and parallel computations.*, , 2000, Technical Report describing the OBLIO software library

Literatura uzupełniająca

[1] Schenk O., Gartner K. — *Two-level dynamic scheduling in PARDISO: Improved scalability on shared memory multiprocessing systems*, Parallel Computing 28, 187-197, 2002,

[2] Fialko S. — *PARFES: A method for solving finite element linear equations on multi-core computers*, Advances in Engineering software, v 40, 12, pp. 1256-1265, 2010, Elsevier

[3] Fialko S. — *The block substructure multifrontal method for solution of large finite element equation SETS*, Technical Transactions, 1-NP/2009, issue 8, p.175 188., 2009, PK

[4] Fialko S. — *Application of AVX (Advanced Vector Extensions) for Improved Performance of the PARFES Finite Element Parallel Direct Solver*, Federated Conference on Computer Science and Information Systems, September 811, 2013. Kraków, Poland. IEEE Xplore Digital Library, pp. 447 454. https://fedcsis.org/proceedings/2013/pliks/98 2013, IEEE

12 Informacje o nauczycielach akademickich

Osoba odpowiedzialna za kartę

dr hab. inż. Sergiy Fialko (kontakt: `sfialko@pk.edu.pl`)

Osoby prowadzące przedmiot

1 dr hab. Sergiy Fialko (kontakt: `sfialko@riad.pk.edu.pl`)

13 Zatwierdzenie karty przedmiotu do realizacji

(miejscowość, data) (odpowiedzialny za przedmiot) (dziekan)

Przyjmuję do realizacji (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

. . . . . .