

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

**High-performance computing in biomedicine/
Высокопроизводительные вычисления в биомедицине**

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки
Physics Methods and Information Technologies in Biomedicine
«Физические методы и информационные технологии в биомедицине»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.П. Демкин

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- УК-1 – способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий;
- ПК-2 – способен использовать свободное владение компьютерными программами анализа многомерных биомедицинских данных в задачах оценки состояния биосистем.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- ИУК-1.1. Выявляет проблемную ситуацию, на основе системного подхода осуществляет ее многофакторный анализ и диагностику.
- ИУК-1.2. Осуществляет поиск, отбор и систематизацию информации для определения альтернативных вариантов стратегических решений в проблемной ситуации
- ИУК-1.3. Предлагает и обосновывает стратегию действий с учетом ограничений, рисков и возможных последствий.
- ИПК-2.1. Знает принципы и методы сбора, обработки и наглядного представления медико-биологической информации.
- ИПК-2.2. Умеет планировать и разрабатывать дизайн медико-биологических исследований с использованием современных компьютерных технологий и программных средств.
- ИПК-2.3. Владеет навыками визуализации, моделирования, анализа результатов биомедицинских исследований.

2. Задачи освоения дисциплины

- Изучить основные архитектуры высокопроизводительных вычислительных систем.
- Изучить простые параллельные алгоритмы линейной алгебры.
- Освоить технологии параллельного программирования OpenMP.
- Освоить настройки программного обеспечения для удаленного доступа к суперкомпьютеру.
- Познакомиться с современным программным обеспечением и научиться его использовать при создании компьютерных моделей биомедицинских систем.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

Дисциплина освещает вопросы использования высокопроизводительных вычислений при решении задач биомедицины и проведения обработки и анализа биомедицинских данных.

Полученные в рамках дисциплины компетенции необходимы для эффективной организации научно-исследовательской работы и написания выпускной квалификационной работы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 3, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для изучения курса необходимо освоить дисциплины, формирующие компетенции в области программирования, компьютерных наук, высшей математики и численных

методов решения задач. Необходимо знать один из языков программирования C\C++ или Fortran. Знать основные алгоритмы и численных методы решения задач линейной алгебры и уравнений в частных производных.

6. Язык реализации

Английский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

– лекции: 18 ч.;

– практические занятия: 18 ч.,

в том числе практическая подготовка: 18 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Введение.

История развития суперкомпьютерных вычислений. Примеры применения MVS для решения сложных задач. Функциональные вычислительные устройства. Многоуровневая и модульная память. Конвейерные и векторные вычисления.

Тема 2. Обзор архитектур высокопроизводительных вычислительных систем.

Многопроцессорные вычислительные системы с общей и распределенной памятью. Примеры современных высокопроизводительных вычислительных систем.

Тема 3. Параллельные вычислительные методы.

Параллельные алгоритмы линейной алгебры. Примеры параллельных алгоритмов сложения векторов, умножения матрицы на вектор и перемножения матриц. Параллельные алгоритмы решения дифференциальных уравнений.

Тема 4. Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP.

Потоки. Многопоточность. Компиляция программ, использующих OpenMP. Последовательные и параллельные области. Задание количества нитей, выполняющих параллельную область. Вложенные параллельные области. Выполнение участка кода в параллельной области только одной нитью. Директивы распределение работы между потоками.

Тема 5. Технологии удаленного доступа. Инфраструктура облачных сервисов.

Удаленный доступ. Удаленный доступ и удаленное управление. Доступ к виртуальным сетям. Клиент удаленного доступа. Сервер удаленного доступа. Протоколы удаленного доступа. Удаленный доступ к специализированному программному обеспечению.

Тема 6. Типы облачных сервисов. Теоретические основы виртуализации.

Типы виртуализации: виртуализация аппаратуры, эмуляция, полная виртуализация, аппаратная виртуализация, паравиртуализация, гипервизор. Виртуализация рабочего места. Потребители облачных вычислений. Модели развертывания.

Тема 7. Облачные сервисы в исследовательском процессе

Применение облачных технологий для проведения научных исследований на примерах удаленного доступа к центрам коллективного пользования ТГУ. Использование специализированного программного обеспечения для повышения эффективности проводимых исследований.

Тема 8. Высокопроизводительные вычисления в медицине и биологии. Основные области применения.

Реализации научных проектов в области медицины и биологии с помощью специализированного программного обеспечения, различных технологий удаленного доступа и облачных сервисов. Использование технологии клиент-сервер.

Тема 9. Применение алгоритмов параллельных вычислений в биомедицине.

Основы использования специализированного программного обеспечения для проведения компьютерного моделирования с применением параллельных вычислений. Принципы построения моделей сложных биомедицинских систем и получение соответствующих численных решений для этих систем.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, оценки практических заданий, предполагающих самостоятельную работу по расчетам, анализу, обработке информации, подготовке и оформлению результатов в форме отчетов.

Текущий контроль фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в третьем семестре проводится в устной форме по билетам. Каждый экзаменационный билет состоит из двух теоретических вопросов по одной из тем дисциплины. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

К экзамену допускаются только те студенты, кто удовлетворительно выполнили все практические задания.

Оценочные материалы текущего контроля и критерии оценивания промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=2958>;

б) Bogoslovskiy N.N. High-performance computing in biomedicine: trans. by A. Nabiullina / Bogoslovskiy N.N., Borisov A.V. – Tomsk: Publishing house of Tomsk State University. – 2016. – 126 pp. – 29 fig.;

в) оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Chandra, R. et al. (2001). Parallel Programming in OpenMP. San Diego: Academic Press, 230 P.

2. Chapman B. Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming (Scientific and Engineering Computation) [Electronic resource] / B.Chapman, G. Jost, R. van der Pas. – Cambridge: MIT Press, 2007. – 378 p. – The electronic version of the printing publication. – <http://mitp-content-server.mit.edu:18180/books/content> (access date: 18.01.2024).

3. Борисов А.В., Воронцов А.А. Введение в MATLAB и его применение для конструирования физических моделей. Учебно-методический комплекс (УМК), 2011. Электронный ресурс. Режим доступа: <http://edu.tsu.ru/eor/resource/119/tpl/index.html> (access date: 18.01.2024).

4. Борисов А.В., Воронцов А.А. Численное моделирование физических процессов с применением метода конечных элементов на базе COMSOL Multiphysics. Учебно-методический комплекс (УМК), 2010. Электронный ресурс. Режим доступа: <http://edu.tsu.ru/eor/resource/110/tpl/index.html> (access date: 18.01.2024).

5. Optical Spectroscopy and Computational Methods in Biology and Medicine electronic resource /edited by Malgorzata Baranska, Dordrecht: Springer Netherlands: Imprint: Springer, 2014, XII, 540 p.

б) дополнительная литература:

1. Rauber T. Parallel Programming for Multicore and Cluster Systems [Electronic resource] / T. Rauber, G. Rünge. – 2013. – Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. – 2nd ed. – 516 p. – The electronic version of the printing publication. – URL: <http://link.springer.com/book/10.1007%2F978-3-642-37801-0> (access date: 18.01.2024).

2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие. Т.1. Механика изд., ФМЛ, 2004.

3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие. Т.6. Гидродинамика ФМЛ, 2005.

в) ресурсы сети Интернет:

1. Онлайн курс «Введение в параллельное программирование» – <https://www.coursera.org/learn/parallelnoye-programmirovaniye> (access date: 18.01.2024)

2. Вэбинары по применению Comsol Multiphysics – <https://www.comsol.com/events/webinars> (access date: 18.01.2024)

3. Материалы по применению Matlab – https://www.mathworks.com/support/books/index_by_categorytitle.html?category=15 (access date: 18.01.2024)

4. Программный интерфейс OpenMP. Официальный сайт – <http://openmp.org/> (access date: 18.01.2024)

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office Access, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.);

– интегрированная среда разработки программного обеспечения Visual Studio;

– клиент для различных протоколов удалённого доступа Putty;

– графический клиент для различных протоколов удалённого доступа WinSCP;

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <https://koha.lib.tsu.ru/>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (при наличии):

– PubMed (<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/>)

14. Материально-техническое обеспечение

Для проведения лекционных и практических занятий используется лаборатория моделирования физических процессов в биологии и медицине (аудитория № 442 второго учебного корпуса ТГУ), оснащенная интерактивной доской, звуковым и видеоборудованием, мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, ресурсов сети Интернет, других учебных материалов. Имеются персональные

компьютеры студентов, с доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

При организации занятий в дистанционном режиме возможно использование технологий – вебинара, Mind.

Помещения для самостоятельной работы, в том числе расположенные в НБ ТГУ, оснащены компьютерной техникой, имеют доступ к сети Интернет, информационным справочным системам, в электронную информационно-образовательную среду.

5. Информация о разработчиках

Лещинский Дмитрий Викторович, м.н.с. лаборатории прогнозирования состояния атмосферы Института оптики атмосферы СО РАН, старший преподаватель кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования, м.н.с. регионального научно-образовательного математического центра, м.н.с. научно-исследовательской лаборатории вычислительной геофизики ТГУ.