



## 研究生课程教学大纲

课 程 名 称：	高性能科学计算		
	High Performance Scientific Computing		
课 程 编 号：	ZX14204D		
开 课 单 位：	材料科学与工程学院	开 课 学 期：	第二学期
课 内 学 时：	32	学 分：	2
适 用 学 科 专业及层次：	材料与化工专业学位博士生		
授 课 语 言：	中文		
先 修 课 程：	《计算材料学》		
负 责 人：	燕友果	团 队 成 员：	张军、李振、王晓

### 一、课程简介

本课程主要讲授高性能科学计算的概念、特征、体系结构和发展趋势，介绍高性能计算系统的并行计算基础和相关技术，介绍并研讨高性能计算在科学研究中的应用和高性能计算的前沿发展与挑战。本课程是对《计算材料学》研究生课程的拓展与延伸。

通过本课程的学习，使学生充分认识高性能科学计算的意义和重要性，全面了解高性能科学计算的架构和技术方法，认识高性能科学计算在材料科学、地球科学、石油工程、生物医药、物理模拟等领域的应用和前景，培养学生采用高性能计算技术与传统研究相结合以助推各科研领域发展的意识，激发学生对高性能科学计算的兴趣，为后续运用高性能计算技术解决实际问题打下坚实基础。

### 二、课程大纲

#### （一）课程目标

目标 1：综合认识高性能计算的概念、应用领域、发展趋势、机遇与挑战。

目标 2：了解高性能计算系统的体系结构和相关技术，以及并行计算基础。

目标 3: 以本课程涉及的研究领域为依托, 扩展学生的学术视野, 提高学生文献综述、学术报告能力。

## (二) 课程内容

### 第一章 概述

本章重点难点: 高性能计算面临的挑战与发展趋势

#### 1.1 高性能计算简介

什么是高性能计算, 为什么进行高性能计算, 高性能计算技术。

#### 1.2 高性能计算的历史、现状及面临的挑战

人类社会发展的计算需求, 高性能计算系统, 高性能计算机产业, 高性能计算面临的挑战。

#### 1.3 高性能计算的发展趋势

应用导向, 新兴应用, 云计算, 传统产业革命。

### 第二章 高性能计算系统体系结构

本章重点难点: 高性能计算系统的组成与架构

#### 2.1 高性能计算硬件基础

CPU, 内存, 存储硬盘, 网络。

#### 2.2 获得高性能的途径

部件性能, 并行与串行, 指令级并行, 多 CPU 并行, 多节点并行。

#### 2.3 基于体系结构的高性能计算机分类

SMP 小型机, MPP 大规模并行机, Cluster 集群系统, 向量机, 向量并行机。

#### 2.4 集群技术

网络互联拓扑, 多级存储结构, Linux 系统, 集群运行与维护。

### 第三章 并行计算基础

本章重点难点: 并行编程与应用

#### 3.1 并行计算模型

计算模型, 并行计算模型, 共享存储类模型, 分布存储模型, 层次模型。

#### 3.2 并行算法的设计技术

算法设计技术的概念, 划分设计技术, 分治设计技术, 平衡树设计技术, 倍增设计技术, 流水线设计技术。

#### 3.3 并行编程

并行编程模型的概念及类型，共享存储的编程模型 OpenMP，消息传递的编程模型 MPI，并程序的调试。

## **第四章 高性能计算与科学应用**

本章重点难点：多尺度计算模拟原理

### **4.1 高性能计算在材料科学领域的应用**

计算材料学概述，多尺度材料计算方法（量子化学计算、分子动力学模拟、蒙特卡洛方法、有限元等），计算材料学应用软件介绍。

采用“学术沙龙”模式，学生自选题目，针对高性能计算在材料科学领域的某一方面应用，通过文献调研和综述，进行学术报告。

### **4.2 高性能计算在生物学领域的应用**

计算生物学概述，分子生物学基础，生物信息学，计算机辅助药物设计，蛋白结构研究。

采用“学术沙龙”模式，学生自选题目，针对高性能计算在生物学领域的某一方面应用，通过文献调研和综述，进行学术报告。

### **4.3 高性能计算在石油工程领域的应用**

石油工程领域工程问题与科学问题。

采用“学术沙龙”模式，学生自选题目，针对高性能计算在石油工程领域的某一方面应用，通过文献调研和综述，进行学术报告。

### **4.4 高性能计算在其他领域的应用**

高性能计算在气象学、工程仿真、遥感、人工智能等领域的应用。

采用“学术沙龙”模式，学生自选题目，针对高性能计算在气象学、工程仿真、遥感、人工智能等领域的某一方面应用，通过文献调研和综述，进行学术报告。

## **第五章 高性能计算中的前沿热点**

本章重点难点：机器学习与数据挖掘概念

### **5.1 机器学习与数据挖掘**

机器学习、深度学习、数据挖掘概念的区别与联系；机器学习基础，数据挖掘基础；机器学习、数据挖掘与高性能科学计算的关系；机器学习与数据挖掘的开展平台，机器学习与数据挖掘的应用。

### **5.2 量子计算**

量子计算概念及基本原理，量子计算机发展现状。

### 三、教学安排及要求

内容	课内学时	教学方式	课外学时	课外环节	课程目标
第一章	4	理论讲授			目标 1
第二章	4	理论讲授			目标 2
第三章	4	理论讲授			目标 2
第四章	16	理论讲授、案例研讨	8	专题调研	目标 1、3
第五章	4	理论讲授			目标 1

### 四、考核内容、方式及评分标准

#### （一）考核环节

考核环节		总成绩占比	支撑课程目标
课堂表现	1. 本课程要求每个学生有一次课堂报告。 2. 成绩采用百分制，主要根据 PPT 准备、讲述表现、讨论表现等评分。	50%	目标 3
课程报告	1. 本课程要求每个学生提交一份课程总结报告。 2. 成绩采用百分制，主要根据对本课程各部分的理解与思考、对本课程内容的掌握情况、撰写规范、报告内容丰富程度和逻辑性等评分。	50%	目标 1、2、3

#### （二）评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
课堂表现	课堂报告不流畅，PPT 制作较差、离题，报告混乱、难以理解。	课堂报告基本完整，PPT 制作一般，报告内容基本切题，能够回答个别提问。	课堂报告较流畅，PPT 制作较好，报告内容较完整、基本切题，能够对提问进行回答。	课堂报告流畅，PPT 美观整洁，报告深入浅出、切题，对提问的回答充分。

课程报告	报告中没有对课程的理解和思考，报告不规范、内容不完整。	报告中有少量的思考和分析，报告内容和格式一般。	报告包含了学生的部分思考和理解，报告内容较完整、格式较规范。	报告体现出学生对课程的思考和深刻理解，报告内容详实、格式规范。
------	-----------------------------	-------------------------	--------------------------------	---------------------------------

## 五、教材与参考资料

1. 历军等，《高性能计算应用概览》，清华大学出版社，2018
2. 陈小辉等，《高性能计算》，中国水利水电出版社，2017

## 六、其它说明

无

大纲执笔人：燕友果、李振

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：