



VII. YÜKSEK BAŞARIMLI HESAPLAMA VE PARALEL PROGRAMLAMA YAZ OKULU PROGRAMI (11 – 22 Haziran 2012)

En son 09.05.2012 tarihinde güncellenmiş olup nihai programda değişiklik yapılabilir.

Temel Linux Eğitimi Programı (11 Haziran 2012, İTÜ Süleyman Demirel Kongre Merkezi - SDKM)

Diğer çalıştaylarda ihtiyaç duyulacak temel Linux bilgisinin verileceği eğitimleri içermektedir. Katılımcıların her birine bilgisayar başında teorik ve pratik bilgiler verilerek temel Linux bilgileri pekiştirilecektir. Ayrıca, eğitim sonunda katılımcıların yüksek başarılı hesaplama sistemlerini kullanabilmeleri için gerekli minimum bilgi ve beceri düzeyine ulaşmaları beklenmektedir.

11 Haziran 2012	
09:15-10:45	Temel Linux Eğitimi I
10:45-11:00	KahveArası
11:00-12:30	Temel Linux Eğitimi II
12:30-13:45	ÖğleYemeği
13:45-15:15	Temel Linux Eğitimi III
15:15-15:30	KahveArası
15:30-17:00	Temel Linux Eğitimi IV

Eğitmenler

Ar.Gör. C. Ahmet MERCAN	c.ahmet.mercan(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Temel Linux Eğitimi
Ar.Gör. Süha TUNA	suha.tuna(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Temel Linux Eğitimi

Temel Linux Eğitimi Programı İçeriği

- Linux dağıtımları nelerdir?
- Çekirdek (kernel) nedir?
- Redhat linux sürümü hakkında
- Linuxta kullanıcı, root kavramları
- Linuxta dosya yapısı nasıldır? Dosya hakları ne demek?
- Login işlemi nasıl olur?
- Temel linux komutları:
cp, ls, cd, rm, rmdir
scp, ssh (rsh, telnet, ftp)

- Dosya işleme programları (Editörler), nano editörü
- Konsol nedir? Terminal kavramları?
- Linuxta uzaktaki makineye erişim ve dosya/dizin aktarımı nasıl yapılır?
- Linuxta uzaktaki makineden görüntü alma nasıl yapılır?

MPI ile Dağıtık Bellek Programlama Çalıştayı Programı
(12-20 Haziran 2012, İTÜ Süleyman Demirel Kongre Merkezi - SDKM)

Katılımcıların dağıtık bellek mimarisindeki hesaplama sunucuları ile tek bir sunucu üzerinde yapılması mümkün olmayan hesaplamaları yapmasına imkan sağlayan MPI kütüphanesi ile dağıtık bellek mimarili programlama bilgi ve becerisini hem teorik ve uygulamalı olarak arttırmaları hedeflenmektedir.							
	12 Haziran 2012	13 Haziran 2012	14 Haziran 2012	15 Haziran 2012	18 Haziran 2012	19 Haziran 2012	20 Haziran 2012
09:15 - 10:45	Açılış, HPC I	HPC III	MPI Noktadan Noktaya Haberleşme III	MPI Türet. Veri Tip. I	Proje I (PDE, Isı denklemi)	MPI-2 + MPI Paralel Girdi / Çıktı Fonksiyonları	Proje II (Fox ve Canon Algoritmaları)
10:45 - 11:00	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası
11:00 - 12:30	HPC II	HPC IV	MPI Noktadan Noktaya Haberleşme IV	MPI Türet. Veri Tip. II	Proje I (Kod yazımı)	MPI Ödev Çözüm MPI Uygulama&Proje	Proje II (Kod yazımı)
12:30 - 13:45	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği
13:45 - 15:15	Neden Yüksek Başarım?	MPI'a Girişi ve Noktadan Noktaya Haberleşme I	MPI Toplu Haberleşme I	MPI Sanal Topoloji I	Proje I (Kod yazımı)	Performans Analizi, Intel Trace Analyzer	Proje II (Kod yazımı)
15:15 - 15:30	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası
15:30 - 17:00	Paralel Programlamaya Giriş	MPI Noktadan Noktaya Haberleşme II	MPI Uygulamaları I	MPI Sanal Topoloji II & Graph Topoloji	Proje I (Çözüm)	Performans Analizi, TAU	Proje II (Çözüm)
17:15 - 18:30	Hoşgeldiniz Kokteyli						

Eğitmenler

Prof.Dr. M. Serdar ÇELEBİ	mscelebi(at)itu.edu.tr	UHeM	Açılış/Temel YBH Kavramları
Ar.Gör C. Ahmet MERCAN	c.ahmet.mercan(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Temel YBH Sistemleri
Ar.Gör. Süha Tuna	suha.tuna(at)be.itu.edu.tr		Temel YBH Sistemleri
Özden AKINCI	ozden.akinci(at)uhem.itu.edu.tr	UHeM	MPI Programlama
Ar.Gör. Bora Akaydın	bora.akaydin(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	MPI Programlama
Ar.Gör Gürsan Çoban	gursan.coban(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	MPI – Programlama
Ar.Gör Şenol PİŞKİN	senol.piskin(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	MPI - PDE Uygulamaları
Ar.Gör. Berk ONAT	berk.onat(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Profile Araçları

MPI ile Dağıtık Bellek Programlama Çalıştayı İçeriği

Yüksek Başarılı Hesaplama (YBH) I-II :

- Yüksek Başarılı Hesaplama (YBH) nedir?
- UYBMH'de mevcut bilgisayar yapısı
- Sistemlere nasıl erişiriz?
- İş teslimi nasıl yapılır ?
- Login Süreci
- Mevcut Yazılımlar

Neden Yüksek Başarım? :

- Paralel programlamaya ihtiyaç duyulma nedenleri
- Yüksek başarılı hesaplama kaynaklarına gereksinim nedenleri

Paralel Programlamaya Giriş

- Paralel programlama nedir?
- Dağıtık ve ortak paylaşım bellekli mimariler
- Paralel hesaplama modelleri

Yüksek Başarılı Hesaplama (YBH) III-IV :

- Linux ortamındaki dosya editörleri
- Kod derleme (Compiling)
- Make komutu makefile dosyası
- Hata ayıklama (Debug)

MPI'a Giriş ve MPI Noktadan Noktaya Haberleşme I-IV :

- Dağıtık hesaplama programlama ve temellerine giriş
- MPI'a giriş
- Basit MPI tabanlı algoritmalar
- Noktadan noktaya gönderme ve alma kavramları ve örnekleri (uygulamalı)

MPI Toplu Haberleşme I-II ve MPI Uygulamalar I-II :

- MPI 'da toplu iletişim (collective communication) yöntemleri
- Toplu haberleşme uygulamaları

MPI Türetilmiş Veri Tipi I-II

- Türetilmiş veri tiplerine (derived data types) dayalı MPI programlama

MPI Sanal Topoloji I-II:

- Haberleşme dünyası (communication world) kavramı
- Sanal kartezyen topoloji yardımıyla MPI programlama
- Sanal graph topoloji yardımıyla MPI programlama

Proje 1 -I(Kısmi Diferansiyel Denklemler) :

- Kısmi Diferansiyeller ve uygulama alanlarının anlatımı
- Örnek kısmi diferansiyel denklemler
- Laplace diferansiyel denklemleri ve ısı denklemleri
- Örnek Uygulamanın anlatılması

Proje 1-II (Kısmi Diferansiyel Denklemler) :

- Sonlu farklar yöntemi ile ısı denkleminin ayrıklaştırılması
- Sınır koşullarının tanımlanması
- Seri kod yazılması ve uygulama

Proje 1-III (Kısmi Diferansiyel Denklemler) :

- Kodun paralelleştirilmesi
- Türetilmiş veri tiplerinin, sanal topolojinin ve gruplamanın uygulama için kullanımı
- Hayalet hücre kavramı
- Uygulama

Proje 1-IV (Kısmi Diferansiyel Denklemler) :

- Örnek kodların incelenmesi, uygulama
- Soru - cevaplar

MPI-2

- MPI-2 özellikleri
- Paralel girdi/çıkı fonksiyonları (parallel I/O)
- Uzaktaki hafızaya erişim (remote memory access)
- MPI'da dinamik süreç yönetimi (dynamic process management)

MPI Ödev Çözümü

Performans Analizi: Intel Trace Analyzer

- Analiz Terminolojisi (Profiling ve Tracing)

- MPI Programlarının Analizi Nasıl Yapılır?
- Intel Trace Analyzer için MPI Programı Derlenmesi ve Çalıştırılması (Uygulamalı)
- Intel Trace Analyzer Arayüzünün Kullanımı (Uygulamalı)

Performans Analizi, TAU

- TAU Analiz Araçlarının Kullanımı
- MPI Programlarının TAU ile Performans Analizi
- TAU ile MPI Program Analizi için Veri Toplama (Uygulamalı)
- TAU Görselleştirme Araçlarının Kullanımı (Uygulamalı)

Proje 2 –I (Matris-Matris çarpım algoritmaları) :

- Matris-matris çarpımının uygulama alanlarının anlatımı
- Matris-matris çarpımını ile ilgili örnekler
- Canon algoritması hakkında bilgi
- Fox algoritması hakkında bilgi

Proje 2-II (Matris-Matris çarpım algoritmaları) :

- Canon algoritmasının seri kodunun yazılması
- Fox algoritmasının seri kodunun yazılması

Proje 2-III (Matris-Matris çarpım algoritmaları) :

- Canon algoritmasının paralelleştirilmesi
- Fox algoritmasının paralelleştirilmesi

Proje 2-IV (Matris-Matris çarpım algoritmaları) :

- Örnek uygulamalar

OpenMP ile Ortak Paylaşımlı Bellek Programlama Çalıştayı Programı
(12-22 Haziran 2012, İTÜ Süleyman Demirel Kongre Merkezi - SDKM)

Katılımcıların, ortak paylaşımlı mimari programlama ile çok çekirdekli/işlemcili sunucular üzerindeki tüm çekirdekleri/işlemcileri kullanacak şekilde programlama yapmasına imkan veren OpenMP programlama bilgisinin ve becerisinin teorik ve uygulamalı olarak geliştirilmesi hedeflenmektedir.				
	12 Haziran 2012	13 Haziran 2012	21 Haziran 2012	22 Haziran 2012
09:15-10:45	Açılış, HPC I	HPC III	SMP'ye Giriş	OpenMP Uyg.&Ödev Çözüm.
10:45-11:00	KahveArası	KahveArası	KahveArası	KahveArası
11:00-12:30	HPC II	HPC IV	OpenMP'ye Giriş I	OpenMP Analizi, Intel Amplifier & Inspector
12:30-13:45	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği	ÖğleYemeği
13:45-15:15	Neden Yüksek Başarım?	-	OpenMP'ye Giriş II	OpenMP + MPI programlama
15:15-15:30	KahveArası	-	KahveArası	KahveArası
15:30-17:00	Paralel Programlamaya Giriş	-	OpenMP Uyg.&Proje	OpenMP & MPI Prog. Uygulamaları
17:15-18:30	Hoşgeldiniz Kokteyli			

Eğitmenler

Prof.Dr. M. Serdar ÇELEBİ	mscelebi(at)itu.edu.tr	UHeM	Açılış/Temel YBH Kavramları
Ar.Gör C. Ahmet MERCAN	c.ahmet.mercan(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Temel YBH Sistemleri
Ar.Gör. Süha Tuna	suha.tuna(at)be.itu.edu.tr		Temel YBH Sistemleri
Ar.Gör. Berk ONAT	berk.onat(at)be.itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	OpenMP Programlama

OpenMP ile Ortak Paylaşımlı Bellek Programlama Çalıştayı İçeriği

SMP'ye Giriş

- Ortak Paylaşımlı Hesaplama Mimarisi
- Ortak Paylaşımlı Mimari Üzerinde Programlamaya Giriş
- Otomatik Paralleleştirme (Uygulamalı)

OpenMP'ye Giriş I

- OpenMP Kod Yapısı
- OpenMP Direktiflerinin (Work sharing regions, parallel regions) Kullanımları (Uygulamalı)

OpenMP'ye Giriş II

- OpenMP'de Senkronizasyon ve Bariyer Yapısı
- Senkronizasyon ve Bariyer Direktiflerinin Kullanımı (Uygulamalı)
- OpenMP için Tehlikeli Bölgeler ve Yapılması Gerekenler (Uygulamalı)

OpenMP Uygulamaları ve Proje

- OpenMP Program Uygulamaları (Uygulamalı)
- OpenMP Ödevi

OpenMP Uygulamaları ve Ödev Çözümü

- OpenMP Program Uygulamalarının Çözümü (Uygulamalı)
- OpenMP Ödev Çözümü (Uygulamalı)

OpenMP Analizi, Intel Amplifier & Inspector

- OpenMP Programlarının Analizi Nasıl Yapılır?
- Intel Inspector Analiz Aracının Kullanımı (Uygulamalı)
- Intel Amplifier Analiz Aracının Kullanımı (Uygulamalı)
- OpenMP Program Optimizasyonu için Yapılması Gerekenler

OpenMP+MPI programlama

- Modeller, avantajları & dezavantajları

OpenMP+MPI Prog. Uygulamaları

- OpenMP+MPI Program Uygulamaları (Uygulamalı)
- Örnek Program Performansları

Hesaplmalı Kimya Çalıştay Programı
(13-15 Haziran 2012, İTÜ Bilişim Enstitüsü 4. kat lab)

Bu yılki çalıştay süresince yaygın olarak kullanılan Gaussian09, Amber, Molpro, Turbomole programlarının Yüksek Başarımli sistemler üzerinde çeşitli uygulamalarla katılımcıların bilgi ve beceri seviyelerinin yükseltilmesi hedeflenmektedir.			
	13 Haziran 2012	14 Haziran 2012	15 Haziran 2012
9:15 - 10:15	Hesaplmalı Kimyaya Giriş	Amber kuvvet alanlarının tanıtılması	Turbomole I
10:15 – 10:30	Kahve Arası		
10:30 – 10:45	Gaussian09 Uygulamaları I (Biomolekuller)	Kahve Arası	Kahve Arası
10:45 – 11:00			
11:00 – 12:00	Öğle Yemeği	Amber için gerekli dosyalarının oluşturulması	Turbomole II
12:00 12:30			
12:30 13:15	Gaussian09 Uygulamaları II (Biomolekuller)	Öğle Yemeği	Öğle Yemeği
13:15 – 13:45			
13:45 – 14:15	Kahve Arası	Amber ile minimizasyon	Molpro I
14:15 – 14:30			
14:30 -15:15	Gaussian09 Metal Katalizör Varlığında Uygulamalar I	Kahve Arası	Kahve Arası
15:15 – 15:30			
15:30 – 15:45	Ara	Amber ile simülasyon ve sonuçların analizi I	Molpro II
15:45 – 16:00			
16:00 – 16:15	Gaussian09 Metal Katalizör Varlığında Uygulamalar II	Ara	Ara
16:15 – 16:30			
16:30 – 16:45	Ara	Amber ile simülasyon ve sonuçların analizi II	Molpro III
16:45 – 17:00			
17:00 – 17:15	Sorular ve Tartışmalar	Ara	Ara
17:15 – 17:30			
17:30 -17:45	Sorular ve Tartışmalar	Ara	Ara
17:45 -18:00			

Eğitmenler

Prof.Dr. Mine YURTSEVER	mine(at)itu.edu.tr	İTÜ Kimya Bölümü	Hesaplmalı Kimyaya Giriş
Yrd.Doç.Dr F. Aylin KONUKLAR	konuklar(at)itu.edu.tr	İTÜ Bilişim Enstitüsü	Gaussian09 Uygulamaları
Doç.Dr Nurcan TÜZÜN	nurcant(at)itu.edu.tr	İTÜ Kimya Bölümü	Gaussian09 Uygulamaları
Yrd.Doç.Dr. Bülent BALTA	bbalta(at)itu.edu.tr	İTÜ Moleküler Biyoloji ve Genetik Bölümü	

Hesaplmalı Kimya Çalıştay İçeriği

Hesaplmalı Kimyaya Giriş

- Hesaplmalı kimya nedir? Hangi alanlarda kullanılır.

Gaussian09 Uygulamaları I-II

- Gaussian09'un biomoleküller üzerinde kullanılması

Gaussian09 Metal Katalizör Varlığında Uygulamalar I-II

- Metal katalizör varlığında Gaussian09'un kullanımı

Amber ve Uygulamaları

- Amber kuvvet alanlarının tanıtılması
- Amber kullanımı için gerekli başlangıç dosyalarının oluşturulması
- Amber kullanılarak minimizasyon gerçekleştirilmesi
- Amber kullanılarak simülasyon gerçekleştirilmesi
- Amber ile yapılmış bir simülasyonun sonuçlarının analiz edilmesi

TURBOMOLE:

- Turbomole'un genel özellikleri
- Turbomole inputunun hazırlanması
- RI-DFT, RI-MP2 ve RI-CC2 metotları ile geometri optimizasyonları
- SCS-MP2 ile counterpoise corrected geometri optimizasyonları

MOLPRO:

- Molpro'nun genel özellikleri
- Molpro inputunun hazırlanması
- Dimerler için potansiyel enerji enerji yüzeylerinin oluşturulması
- HF, MP2, CCSD(T) ve B3LYP-D metotları ile Supermolekuler etkileşim enerji (interaction energy) hesaplamaları
- DFT-SAPT (Symmetry adapted perturbation theory) ile etkileşim enerji hesaplamaları

Hesaplamalı Nano Bilim Çalıştayı Programı
(18-20 Haziran 2012, İTÜ Bilişim Enstitüsü 4. kat lab)

Hesaplamalı Nanobilim Çalıştayı'nda katılımcılara elektronik yapı teorisinin malzeme tasarımında nasıl kullanılabileceğini öğretmeyi hedeflemekteyiz. Çalıştay sürecinde, VASP, Siesta ve Quantum Espresso gibi elektronik yapı programları ile çeşitli uygulamalar yapılacaktır.

	18 Haziran 2012	19 Haziran 2012	20 Haziran 2012
9:15 – 10:15	Temel DFT bilgisi	VASP'a Giriş	SIESTA ve TRANSIESTA'ya Giriş
10:15 – 10:30		Kahve Arası	Kahve Arası
10:30 – 10:45			
10:45 – 11:00	Kahve Arası	VASP'in Uygulama Alanları	SIESTA ve TRANSIESTA'nin Uygulama Alanları
11:00 – 12:00	Quantum Espresso'ya Giriş	Öğle Yemeği	Öğle Yemeği
12:00 – 12:30			
12:30 – 13:15	Öğle Yemeği	Vasp Uygulamaları I	SIESTA ve TRANSIESTA Uygulamaları I
13:15 – 13:45			
13:45 – 14:15	Quantum Espresso Uygulama I		
14:15 – 14:30			
14:30 – 15:15			
15:15 – 15:30	Kahve Arası	Kahve Arası	Kahve Arası
15:30 – 15:45	Quantum Espresso Uygulama II	Vasp Uygulamaları II	SIESTA ve TRANSIESTA Uygulamaları II
15:45 – 16:00			
16:00 – 16:15			
16:15 – 16:30			
16:30 – 16:45			
16:45 – 17:00			

Eğitmenler

Doç. Dr. Savaş BERBER	savasberber(at)gyte.edu.tr	Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü Fizik Bölümü	DFT/Quantum Espresso
Dr. H. Hakan GÜREL	gurelh(at)unam.bilkent.edu.tr	Bilkent Üniversitesi Malzeme Bilimi ve Nano Teknoloji Enstitüsü (UNAM)	VASP/Siesta/Transiesta
Dr. Mehmet Topsakal	metokal(at)gmail.com	Bilkent Üniversitesi Malzeme Bilimi ve Nano Teknoloji Enstitüsü (UNAM)	VASP/Siesta/Transiesta
Ongun Özçelik	ongunozcelik(at)gmail.com	Bilkent Üniversitesi Malzeme Bilimi ve Nano Teknoloji Enstitüsü (UNAM)	VASP/Siesta/Transiesta

Hesaplamalı Nano Bilim Çalıştayı İçeriği

Temel DFT bilgisi

- DFT'nin temelleri ve kavramlar üzerine açıklamalar

Quantum Espresso'ya Giriş

- Quantum Espresso'nun kullanım alanları ve temel özellikleri

Quantum Espresso Uygulama I-II

- Quantum Espresso ile uygulamalar

VASP'a Giriş

- VASP kodunun tanıtımı.
- Lisansın elde edilmesi,
- Web sayfası, kullanıcı forumu,
- Kodun özellikleri, yapısı,
- UYBHM de kurulumu, "parallel scaling" performansı,
- VASP input-output dosyalarını oluşturmak veya görüntülemek için P4VASP, VESTA, XCRYSTAL gibi yardımcı programların tanıtımı.

VASP'in Uygulama Alanları

Bilkent-UNAM kullanıcıları olarak UYBHM de VASP programını kullanarak yayınladığımız makalelerden örnekler verilerek katılımcılara VASP ile neleri hesaplayabilecekleri hakkında bilgi verilecek.

VASP uygulamaları I-II

- VASP input dosyalarını tanıma ve ilk hesabı verme. Daha sonrasında oluşan output dosyalarını inceleme.
- Silicene (graphene in silisyum atomlarından oluşan hali) malzemesi için gerekli input dosyalarını hazırlama ve ideal lattice vektörünü bulma.
- Silicene malzemesi için Density of States (DOS) hesabı yapma.
- Silicene malzemesi için "band structure" hesabı yapma.
- Silicene malzemesi için phonon hesabı yapma.
- Silicene malzemesi için HSE06 ve GW hesabı vermek için gerekli input dosyalarının oluşturulması.
- VASP ile ilgili örnekler

SIESTA ve TRANSIESTA'ya Giriş

- SIESTA ve TranSIESTA kodlarının tanıtımı.
- Open-source olan SIESTA ve TranSIESTA kodlarının elde edilmesi,
- Web sayfası, kullanıcı forumu, potansiyellerinin adresi,
- Kodun özellikleri, yapısı,
- VASP ile SIESTA arasındaki farklılıklar, avantaj ve dezavantajlar.
- UYBHM de kurulumu, "parallel scaling" performansı,
- TranSIESTA için teorik ön bilgi,
- Input-output dosyalarını oluşturmak veya görüntülemek için GDIS, VESTA, jMOL gibi yardımcı programların tanıtımı.

SIESTA ve TRANSIESTA'nın Uygulama Alanları

Bilkent-UNAM kullanıcıları olarak UYBHM de SIESTA ve TranSIESTA programını kullanarak yayınladığımız makalelerden örnekler verilerek katılımcılara bu programlar ile neleri hesaplayabilecekleri hakkında bilgi verilecek.

SIESTA ve TranSIESTA uygulamaları I-II

- SIESTA input dosyalarını tanıma ve ilk hesabı verme.
- Graphene malzemesi için gerekli input dosyalarını hazırlama ve ideal lattice vektörünü bulma.
- Graphene malzemesi için Density of States (DOS) hesabı yapma.

- Graphene malzemesi için "band structure" hesabı yapma.
- Graphene nanoşerit oluşturma ve oluşturduğumuz nanoşerit için TranSIESTA programı kullanarak "conductance" ve "current-voltage (I-V)" hesaplarının yapılması.
- SIESTA ve TranSIESTA ile ilgili örnekler.