

Cálculo científico avanzado (CALC)

Versión 1.0

22 de octubre de 2009

1. Datos iniciales de identificación

Nombre de la asignatura	Cálculo científico avanzado (CALC)
Módulo al que pertenece	Computación Científica Avanzada y Arquitecturas Específicas y de Altas Prestaciones para Percepción y Simulación .
Carácter	Obligatoria
Titulación	Máster en Computación Avanzada y Sistemas Inteligentes (http://casi.uv.es)
Ciclo	Postrado
Créditos asignatura/módulo	5 ECTS / 10 ECTS
Departamento	Departament de matemàtica aplicada (http://www.uv.es/matapl)
Profesor responsable	Pep Mulet
Otros profesores	Francesc Aràndiga

2. Introducción a la asignatura

En distintas disciplinas científicas aparecen con frecuencia problemas matemáticos, tales como sistemas de ecuaciones lineales o no lineales, optimización, sistemas de ecuaciones diferenciales, etc. Algunos de estos problemas sólo se pueden resolver aproximadamente, mediante métodos numéricos que pueden requerir ingentes cantidades de cálculos para dichas aproximaciones.

Esta asignatura trata algunas técnicas generales para la programación de estos métodos numéricos que pueden contribuir a una disminución considerable de su tiempo de ejecución.

En la primera parte de la asignatura se describen las técnicas de optimización de código secuencial. Estas técnicas parten de un conocimiento del funcionamiento a alto nivel de las unidades operativas (microprocesadores, memoria, etc) y de sus capacidades computacionales y de acceso a datos, para plantear código que pueda aprovecharlas con eficiencia.

Al haber establecido en la primera parte la necesidad de uso de ciertas técnicas específicas para obtener las prestaciones necesarias para la ejecución satisfactoria de un cierto método numérico y de la dificultad que esto conlleva, en la segunda se introduce la librería LAPACK para ejecutar algoritmos de altas prestaciones en el ubicuo ámbito de los problemas del álgebra lineal.

Después de haber tratado las técnicas de cálculo de altas prestaciones en sistemas con un solo procesador, en la tercera parte se introduce la posibilidad de programación de algunos métodos numéricos en sistemas de memoria distribuida por paso de mensajes.

3. Volumen de trabajo

Los 5 ECTS de esta asignatura se corresponden con 125 horas de trabajo del alumno que se descomponen de la siguiente manera:

Asistencia a clases de teoría	7 sesiones de 2 horas	14
Asistencia a clases prácticas	6 sesiones prácticas de 2.5 horas	15
Asistencia a exámenes	la evaluación será continua y se distribuirá entre varias sesiones	2
Total asistencia programada		31
Asistencia a tutorías	mínimo de horas que cada estudiante deberá citarse personalmente con el profesor	1
Total presencial		32
Estudio y preparación de clases, trabajos y resolución de ejercicios	Horas estimadas de trabajo necesario para superar la asignatura	93
Volumen de trabajo total		125

4. Objetivos Generales

- Establecer la necesidad de implementar métodos numéricos para cálculo científico, que resulten eficientes con respecto al tiempo de ejecución y/o recursos de almacenaje.
- Lograr un entendimiento de las posibilidades que nos ofrecen los sistemas computacionales y de las técnicas algorítmicas para aprovecharlas.
- Emplear alguna librería para cálculo científico de altas prestaciones.

5. Contenidos

- Introducción a la arquitectura de sistemas computacionales monoprocesador: análisis de prestaciones.
- Conceptos algorítmicos para conseguir altas prestaciones: localidades espacial y temporal, estructuras de datos, etc.
- Código de altas prestaciones para álgebra lineal. Librerías BLAS y LAPACK.
- Sistemas computacionales multiprocesador: algoritmos en sistemas de memoria distribuida por medio de paso de mensajes (librería MPI).

6. Destrezas a adquirir

- Identificación de los problemas matemáticos subyacentes al cálculo científico.
- Técnicas de codificación de algoritmos eficientes para cálculo científico.
- Comprensión de que a diferentes arquitecturas de sistemas computacionales corresponden diferentes técnicas de optimización del código.
- Uso de herramientas y librerías estándar para cálculo científico.

7. Habilidades sociales

- Adquisición del nivel suficiente en lenguaje tecnológico para coordinarse con profesionales técnicos.
- Capacidad de trabajar en grupo utilizando tecnologías de la información y de la comunicación.

8. Temario y planificación temporal

1. Introducción a la arquitectura de sistemas monoprocesador:
 - Jerarquía de memorias.
 - *Pipelines* computacionales
 - Análisis del tiempo de ejecución de operaciones básicas
2. Conceptos algorítmicos para conseguir altas prestaciones:
 - Localidad espacial
 - Localidad temporal

- Acceso secuencial a datos
 - Análisis del tiempo de ejecución de operaciones vectoriales
3. Código de altas prestaciones para álgebra lineal.
 - Librerías BLAS y LAPACK.
 - Resolución de sistemas lineales y de valores y vectores propios.
 4. Sistemas computacionales multiprocesador.
 - Distinción entre sistemas con memoria compartida y distribuida.
 - Programación por paso de mensajes en sistemas de memoria distribuida: librería MPI.
 - Implementación MPI de algoritmos para el álgebra lineal
 - Implementación MPI de algoritmos para ecuaciones en derivadas parciales.

9. Bibliografía de referencia

Bibliografía básica

- [1] G.H. Golub, C. van Loan., Matrix computations, John Hopkins (1989).
- [2] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, SIAM (2003).
- [3] K.A Gallivan et al., Parallel Algorithms for Matrix Computations, SIAM (1987).
- [4] E. Anderson et al., LAPACK users' guide. SIAM (1992).
- [5] V. Kumar et al., Introduction to parallel computing, The Benjamin/Cummings Publishing Company (1994).
- [6] G.H. Golub, J.M. Ortega, Scientific computing and differential equations. An introduction to numerical methods. Academic Press (1992).

10. Conocimientos previos

Se suponen conocimientos básicos de álgebra lineal, análisis matemático y métodos numéricos. También se suponen conocimientos de algún lenguaje de programación, algoritmos y estructuras de datos así como familiaridad con la programación en C y matlab.

11. Metodología

El desarrollo de la asignatura se estructura en torno a cuatro ejes: las sesiones de teoría, las de problemas prácticos (resueltos en el aula con el ordenador), las tutorías y la preparación y posterior exposición de un trabajo individual por cada alumno. Por lo que respecta a las primeras, el alumno asistirá a una clase teórica por semana, donde el profesor desarrollará los puntos principales del temario comentado. El alumno debe atender al tiempo de preparación de las clases previsto para su aprovechamiento óptimo. Las clases prácticas (6 en total) servirán para que el alumno verifique el grado de conocimiento adquirido, enfrentándose a problemas relativamente complejos y analizando los resultados obtenidos. Las sesiones prácticas llevarán asociado un formulario para que el alumno reporte los datos obtenidos al profesor. Al igual que antes, el alumno deberá preparar dichas sesiones para poder realizar los experimentos en el tiempo previsto. Todo intercambio de información entre profesor y alumno se realizará a través del aula virtual de la Universitat de València (aulavirtual.uv.es). Los trabajos finales tendrán un carácter teórico/práctico.

12. Evaluación del aprendizaje

La evaluación será continua. Los ejercicios entregados o resueltos en clase serán puntuados, así como los pequeños proyectos desarrollados por los alumnos. Además se puntuarán las intervenciones de los alumnos en clase. Como mínimo todo alumno deberá exponer en público algún trabajo relacionado con la asignatura. Al final de la asignatura, se realizará un examen que podrá ser opcional para aquellos alumnos que cuenten con nota suficiente.