

Comp. 2000  
20

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

1. DEPARTAMENTO: Computación
2. CUATRIMESTRE: Segundo de 2000
3. ASIGNATURA: Sistemas Complejos en Máquinas Paralelas
4. CARRERA: Licenciatura en Ciencias de la Computación
5. CARACTER DE LA MATERIA: Optativa
6. NUMERO DE CODIGO DE CARRERA: 18
7. NUMERO DE CODIGO DE MATERIA: C .....
8. PUNTAJE: 3
9. PLAN DE ESTUDIOS AÑO: (1987 y 1993)
10. DURACION DE LA MATERIA: cuatrimestral
11. HORAS DE CLASE SEMANAL:
  - a) TEORICAS/PRACTICA y LABORATORIO: 3hs
  - b) LABORATORIO: ---
  - c) PRACTICAS:
  - d) SEMINARIOS: ---
12. CARGA HORARIA TOTAL: 3hs semanales. 45 hs cuatrimestrales.
13. ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Algoritmos y Estructura de Datos II, Métodos Numéricos (Plan 93) – Programación de computadores II y Laboratorio IV (Plan '87)
14. FORMA DE EVALUACION: prácticos y final
15. PROGRAMA Y BIBLIOGRAFIA: adjuntos a esta hoja

Fecha: 29 de junio 2000

  
Prof. Responsable  
Dr. Guillermo Marshall

  
Directora Dra. Patricia Borensztein

# Sistemas Complejos en Máquinas Paralelas

Dictado por Guillermo Marshall, segundo cuatrimestre de 2000.

## Contenido tentativo

1. Introducción a la simulación numérica de sistemas dinámicos: ecuaciones diferenciales no lineales, ordinarias y en derivadas parciales, como sistemas complejos de la física computacional; sistemas dinámicos determinísticos, coherentes y caóticos, sistemas dinámicos estocásticos. Etapas de la simulación numérica: modelo fenomenológico, modelo físico, modelo matemático, modelo numérico e implementación computacional en máquinas secuenciales y en paralelo. Necesidad de la computación científica en gran escala: el sistema super escalar .

2. Introducción a la computación en paralelo. Arquitectura de computadoras. La computadora básica. Procesadores. Memoria. Cache. Memoria Virtual. Memoria Inter-leaved. Bus y ancho de banda de I/O.

3. Computación de alta performance (HPC). Paralelismo. Granularidad. Clasificación Tradicional de computadoras. Taxonomía de Flynn's. Arquitectura de procesadores rápidos. Procesadores en pipeline. Procesadores Vectoriales. Procesadores Superescalares. Arquitecturas SIMD y MIMD – organización de la memoria: memoria compartida y memoria distribuída.

4. Introducción al sistema operativo Linux. Instalación de Linux. Comandos de Linux. Organización de los datos. Configuración del sistema de X windows. Utilización de GNOME. Utilización de aplicaciones de Linux. Tex, StarOffice, Corel Wordperfect, Matlab, aplicaciones graficas, etc.. La plataforma virtual Vmware, el sistema Wine.

5. Estándares de pasaje de mensajes (Message Passing), PVM (Parallel Virtual Machine) y MPI (Portable parallel Programmng). Ventajas y desventajas de MPI y PVM. La arquitectura Beowulf. MPI Elemental. Conexión con C y Fortran. Fortran 77 y Fortran 90 HP (High Performance). Inicialización y finalización del MPI. MPICH (MPI y Chameleon): una implementación portable de MPI. Construcción de un código MPI Elemental. Ejecución de un código MPI. Cálculo elemental de la escalabilidad. MPI bajo Windows NT.

6. Pasaje de mensajes. Contenido del mensaje. Tipo de datos en Fortran y en C. Protocolos de comunicación. Comunicación punto a punto. Modos de comunicación. Envoltura de la comunicación. Bloqueo. Medición del tiempo. Costo de la Comunicación. Ejemplos: descomposición por subdominios y métodos sincrónicos, solución de la ecuación de Laplace unidimensional por el método de Jacobi. Algoritmos explícitos para problemas evolucionarios unidimensionales.

6. Estrategias de programación. Algoritmos paralelos. Comunicaciones y balance de carga. Balance de carga estático. Balance de carga estático-dinámico. La programación de problemas determinísticos y estocásticos. El método de Monte Carlo. Ejemplos de fractales determinísticos y

Dra. PATRICIA BORENSZTEJ  
DIRECTORA  
DEPTO. DE COMPUTACION  
F. C. E. Y N. UBA

estocásticos. El método de Witten y Sander. Generación de números aleatorios en máquinas paralelas.

7 Ambiente de graficación MPE. Introducción y ejemplos. Estrategias de programación. Ejemplos: métodos implícitos para la solución de la ecuación de Laplace o Poisson 2D. Métodos directos y métodos iterativos. Solución de la ecuación de difusión 1D y 2D.

8. Operaciones globales. Broadcast. Reducción global. Ejemplos, Laplace o Poisson. MPI avanzado. Comunicaciones no bloqueantes. Cálculo y comunicación simultánea. Comunicación 'justo a tiempo'. Ejemplos. Comunicación en anillo. Ecuación de Poisson. Tipo de datos derivados – Buffering. Metodología MPI . Ejemplos.

9. Introducción a los fractales físicos y matemáticos, determinísticos y estocásticos. Crecimiento de formas dendríticas y fractales en física y biología, ejemplos. Introducción a los autómatas celulares. Redes de autómatas. Autómatas celulares 1D y 2D. El juego de la vida de Conway. Ejemplos elementales de computación secuencial y paralela de fractales determinísticos y estocásticos y autómatas celulares.

10. Introducción a las librerías paralelas: ScaLAPACK (Scalable Linear Algebra Package), y PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation). Los sistemas LINDA y PARAMESH para la resolución en paralelo de sistemas algebraicos y generación de malla dinámica.

#### 11. Proyectos.

Solución numérica de ecuaciones diferenciales parabólicas en dominios cilíndricos: Burgers, Navier-Stokes (2D y 3D), Benard (2D), recirculación con transferencia de calor y masa (2D). Solución numérica de ecuaciones diferenciales en dominios no cilíndricos: problemas de Stefan (1D). Solución numérica de sistemas hiperbólicos no lineales: El problema de Riemann en dinámica de gases (tubo de ondas de choque) y su analogía hidráulica (rotura de presas). Las ecuaciones de Buckley-Leverett para flujos en medios porosos.

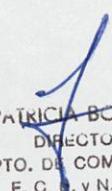
Ecuación de difusión 3D. Ecuación de Navier-Stokes 3D. Ecuación de Stefan 2D.

Autómata celular 2D. Ejemplos de atractores fractales (solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias). Problemas de agregación ramificada (2D), el modelo DBM.

Problemas de deposición electroquímica, las ecuaciones de Nernst-Planck. El problema de la adimensionalización. Simulación del modelo 1D. Las ecuaciones de transporte. Simulación 2D. El modelo de agregación. Electroconvección y gravito-convección, modelo 3D y su simulación numérica en cuasi-3D. Mecanismos determinísticos y estocásticos de agregación. Programación en paralelo de un código secuencial de electrodeposición (1D y 2D).

El método PIV (Particle Image velocimetry): velocimetría de partículas por imágenes de video : cálculo secuencial y en paralelo de las velocidades de un conjunto de partículas trazadoras arrastradas en un fluido para determinar su régimen hidrodinámico.

## BIBLIOGRAFIA

  
Dra. PATRICIA BORENSZTEIN  
DIRECTORA  
DEPTO. DE COMPUTACION  
F. C. E. y N. UBA

- E. Arguijo y G. Marshall, Un problema de magnetohidrodinámica resuelto en un banco de transputers, trabajo contribuido No. 14/6, Conferencia nacional en Física Pura y Aplicada, Asociación Física Argentina, Octubre 13-16, 1992, Buenos Aires.
- M. Barnsley, *Fractals Everywhere*, Academic Press, New York, 1988.
- M. Barnsley. *The Desktop Fractal Design Handbook*, (manual y diskette), Academic Press, New York, 1989
- R. Courant, K. Friedrichs and H. Lewy, *IBM Journal*, 11 (1967) 215 (traducción inglesa del trabajo original publicado en *Math. Annalen*, 100, (1928) 32).
- R. L. Devaney, *Chaos, Fractals, and Dynamics: computer experiments in mathematics*, Addison-Wesley, Menlo Park, 1990.
- R. L. Devaney, *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, Addison-Wesley, Menlo Park, 1989.
- H. Dietz, "Linux Parallel Processing: HowTo", <http://www.ecn.purdue.edu/~pplinux> , v980105, 1998.
- A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, W. Jiang, R. Manchek, V. Sunderam, "PVM: Parallel Virtual Machine. A User's Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing", Janusz Kowalik Editor, MIT Press, 1994
- W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, "Using MPI: Portable Parallel Programming with Message-Passing Interface", Janusz Kowalik Editor, MIT Press, 1994.
- W. Hackbusch and U. Trottemberg, *Multigrid methods*, Springer, Berlin, 1982.
- H. Haken, *Synergetics: An Introduction*, 2nd. Ed., Springer, Berlin 1978.
- H. Haken, Ed. *Dynamics of Synergetic Systems*, Springer, Berlin, 1980.
- M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo methods*, Vol. I: Basics, Wiley, New York, 1986.
- S. Kirkpatrick, C. Gelatt, and M. Vecchi, *Optimization by simulated annealing*, *Science*, vol. 220, (1983) 671.
- L. Lapidus and G. F. Pinder, *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*, Wiley, New York, 1982.
- E. Lawler, J. Lenstra, A. Rinnooy Kan, and D. Shmoys, Ed., *The Travelling Salesman Problem*, Wiley (1973)
- B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco, 1982.
- G. Marshall, *Solucion numerica de ecuaciones diferenciales*, Tomo I : ecuaciones diferenciales ordinarias (1985); Tomo II: ecuaciones en derivadas parciales (1986), Reverte, Buenos Aires.
- G. Marshall, *Comput. Phys. Comm.* 56 (1989) 51.
- G. Marshall and E. Arguijo, *Chaos, Solitons and Fractals*, Vol. 2, No. 5, (1992), 531.
- G. Marshall and P. Mocsos, A Growth Model for Ramified Electrochemical Deposition in the presence of diffusion, migration and electroconvection , *Phys. Rev. E* 55, 1, 549 (1997).
- G. Marshall, *Monte Carlo methods for the solution of nonlinear partial differential equations*, *Comput. Phys. Comm.* Vol. 56, 51, 1989, North Holland.
- D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 2, Addison-Wesley, Reading, Massachussets, 1969.
- J. M. Ortega and R. G. Voigt, *SIAM Rev.* 27, (1985) 2.
- L. Pietronero and E. Tosati, Eds., *Fractal in Physics*, North Holland, Amsterdam, 1986
- W. H. Press, B. Flannery, S. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (texto, manual de uso de subrutinas y diskette), Cambridge University Press, Cambridge, 1986.
- Proyecto Beowulf de la Universidad de Drexel: <http://www.physics.drexel.edu> ; Proyecto Beowulf de CESDIS en la NASA: <http://cesdis1.gsfc.nasa.gov/beowulf> .

Dra. PATRICIA BORENSZTEJN  
 DIRECCION  
 DEPTO. DE COMPUTACION  
 F. C. E. Y N. UBA

- R. D. Richtmyer and K. W. Morton, Difference Methods for Initial Value Problems. Interscience, New York, 1967.
- Y. A. Schreider, The Monte Carlo Method, Pergamon, New York, 1966.
- H. G. Solari, M. A. Natiello and G. M. Mindlin, Nonlinear Dynamics: a two way trip from physics to math, Institute of Physics Publishing, London, 1996.
- H. Takayasu, Fractal in the Physical sciences, Manchester University Press, U.K., (1990).
- T. Vicsek, Fractal Growth Phenomena, World Scientific, Singapore, (1989),
- G. Weisbuch, Complex Systems Dynamics, Addison-Wesley (1991).
- S. Wolfram, Theory and Applications of Cellular Automata, World Scientific (1986).
- Thomas L. Sterling, John Salmon, Donald J. Becker, and Daniel F. Savarese, "How to Build a Beowulf: A guide to the implementation and application of PC Clusters" Scientific and Engineering Computation Series, MIT Press, 1999.



Dra. PATRICIA BORENSZTEIN  
DIRECTORA  
DEPTO. DE COMPUTACION  
F. C. E. y N. UBA