

C 2006
19



**Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales**

Planilla a completar para presentación de Cursos de Posgrado

1.- DEPARTAMENTO de COMPUTACION.....

2.- NOMBRE DEL CURSO: **Sistemas complejos y máquinas paralelas**

3.- DOCENTES:

RESPONSABLE/S: **Profesor Dr. Guillermo Marshall**

COLABORADORES:.....

AUXILIARES:

4.- CARRERA de DOCTORADO

5.- AÑO: 2006..... CUATRIMESTRE/S: 1° y 2° 2006

6.- PUNTAJE PROPUESTO PARA CARRERA DE DOCTORADO: 3 (tres) puntos

7.- DURACIÓN (anual, cuatrimestral, bimestral u otra):cuatrimestral

8.- CARGA HORARIA SEMANAL:

Teóricas:.....

Problemas:.....

Seminarios:.....

Teórico – Práctico-Laboratorio: **6 hs.**

Salida a Campo:.....

9.- CARGA HORARIA TOTAL: **90 hs.**.....

10.- FORMA DE EVALUACIÓN: **parciales y final**

11.- PROGRAMA ANALÍTICO (adjuntarlo).

12.- BIBLIOGRAFÍA (indicar título del libro, autor, Editorial y año de publicación)(adjuntada). No fue adjuntada por el docente.

11.- PROGRAMA ANALÍTICO (adjuntarlo).

El estudio de los sistemas complejos tales como el caos, los fractales, los autómatas celulares y los patrones de crecimiento, entre otros, es considerado uno de los grandes desafíos científicos de este siglo por la Academia Nacional de Ciencias de USA. La programación paralela en clusters de PC's es el nuevo paradigma de la computación científica en gran escala y otro de los grandes desafíos de este siglo. El objetivo de la materia es dotar al alumno de los conocimientos básicos de sistemas complejos y de la programación serial y paralela de los mismos.

1. Introducción a la simulación numérica de sistemas dinámicos: ecuaciones diferenciales no lineales, ordinarias y en derivadas parciales, como sistemas dinámicos complejos de la física e ingeniería computacionales; 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 Beowulf.

2. Introducción a la computación en paralelo. Arquitectura de computadoras. La computadora básica. Procesadores. Memoria. Cache. Memoria Virtual. Memoria Interleaved. 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 distribuida.

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, Matlab, aplicaciones gráficas, etc..

5. Estándares de pasaje de mensajes (Message Passing), PVM (Parallel Virtual Machine) y MPI (Portable parallel Programming). 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. 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 y colectivas. Comunicación estructurada en árbol. 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 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, Pack/Unpack. Metodología MPI. Ejemplos. Comunicadores y topología. Performance serial y paralela, costo de la comunicación, medición de tiempos. Ley de Amdahl, trabajo y overhead. Escalabilidad. Herramienta para evaluación de performance. Profiling en MPI, Upshot.

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. Resolución paralela de sistemas algebraicos provenientes de ecuaciones elípticas por métodos directos utilizando ScaLAPACK, PETSc y PARAMESH.

11. Proyectos (optativos para estudiantes avanzados). 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). 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.

12.- BIBLIOGRAFÍA (indicar título del libro, autor, Editorial y año de publicación)

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", MIT Press, 1994.

J. Glimm, G. Marshall and B. Plohr, A generalized Riemann Problem for Quasi-One-Dimensional.

Gas Flows, Advances in Applied Mathematics, Vol. 5, 1984.

W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum, "Using MPI: Portable Parallel Programming with Message Passing Interface", MIT Press, Second Edition, 1999.

W. Gropp, E. Lusk, and R. Thakur, "Using MPI-2: Advanced features of the Message-Passing Interface", Janusz Kowalik Editor, MIT Press, 1999.

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. McCarty, Learning Red Hat Linux, O'Reilly, 1999.

B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco, 1982.

G. Marshall and R. Mendez, Computational aspects of the Random Choice Method for shallow water equations, *J. Comput. Physics*, Vol. 39, No. 1, 1981.

G. Marshall and A. Menendez, Numerical solution of the dam failure problem by the Random Choice Method, *Adv. Water Res.*, Vol. 4, No. 3, 1981.

G. Marshall and A. Menendez, Numerical treatment of non conservation forms of the equations of shallow water theory, *J. Comput. Phys.* Vol. 44, No.1, 1982.

G. Marshall and B. Plohr, A Random Choice Method for Two-Dimensional Steady Supersonic Shock Wave Diffraction Problems, *J. Comput. Phys.*, Vol. 56, No.3, 1984.

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, A Front Tracking Method for One Dimensional Moving Boundary Problems, *SIAM J. Sc. Stat. Comput.*, Vol. 7, Nr. 1, 1986.

G. Marshall, Monte Carlo Finite Difference Methods for the Solution of Hyperbolic Equations, in J. Ballmann and R. Jeltsch, Ed. *Nonlinear Hyperbolic Equations-Theory, Computations Methods, and Applications*, Notes in Numerical Fluid Mechanics Vol. 24, Vieweg, Braunschweig, 1989.

G. Marshall, Monte Carlo methods for the solution of nonlinear partial differential equations, *Comput. Phys. Comm.* Vol. 56, 51, 1989, North Holland.

G. Marshall and E. Arguijo, Growth Pattern Formation in Benard Flows, *Physica A* (1992) 185.

G. Marshall and E. Arguijo, Growth Pattern Formation Driven by External Flows, *Chaos, Solitons and Fractals*, Vol.2, No.1, 1992, 531.

G. Marshall and L. Lam, *Complex Systems in Computational Physics*, Editors, , *Proceedings of the First International Conference on Complex Systems in Computational Physics*, Buenos Aires, October 18-22, 1993, in *Chaos, Solitons and Fractals*, Vol. 6, (1995), Pergamon, 400 pp.

G. Marshall, E. Perone, P. Tarela and P. Mocskos, A Macroscopic Model for Growth Pattern Formation in Electrodeposition, *Chaos, Solitons and Fractals*, Vol. 6, (1995) 315, Pergamon.

G. Marshall, S. Tagtachian and L. Lam, Pattern Formation in Copper Electrodeposition: Experimental and Computational Modelling, *Chaos, Solitons and Fractals*, Vol. 6, (1995) 3250.

G. Marshall and P. Mocskos, A Growth Model for Ramified Electrochemical Deposition in the Presence of Diffusion, Migration and Electroconvection, *Phys. Rev. E* 55, (1997) 549.

G. Marshall, P. Mocskos, H. L. Swinney and J. M. Huth, Buoyancy and Electrical Driven Convection Models in Thin-layer Electrodeposition, *Phys. Rev. E* 59 (1999) 2157.

G. Marshall, Introducción a los sistemas complejos de la física e ingeniería computacionales, Notas de clases (2001). (Solicitar copia al autor).

J. C. Bradley, S. Dengra, G. A. Gonzalez, G. Marshall and F. V. Molina, Ion transport and deposit growth in spatially coupled bipolar electrochemistry, *J. Electroanal. Chem.* 478 (1999) 128.

S. Dengra, G. Marshall and F. Molina, Front tracking in thin-layer electrodeposition, *J. of the Physical. Society of Japan* 69 (2000) 963.

D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 2, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1969.

J. M. Ortega and R. G. Voigt, *SIAM Rev.* 27, (1985) 2.

P. Pacheco, *Parallel programming with MPI*, Morgan Kaufmann, San Francisco, 1997.

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>.

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.

D. HM Spector, Building Linux clusters, O'Reilly, 2000.

H. Takayasu, Fractal in the Physical sciences, Manchester University Press, U.K., 1990.

Thomas L. Sterling, John Salmon, Donald J. Becker, and Daniel F. Savarese, "How to Build A Beowulf: guide to the implementation and application of PC Clusters" Scientific and Engineering Computation Series, MIT Press, 1999.

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.


Dr. Alejandro N. Ríos
Departamento de Computación
FCEyN UBA