



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Planilla a completar para presentación de Cursos de Posgrado

1.- DEPARTAMENTO de COMPUTACIÓN

2.- NOMBRE DEL CURSO: "Herramientas de HPC y aplicaciones"

3.- DOCENTES:

RESPONSABLE/S: Dr. Adrián Turjanski.

COLABORADORES: Dr. Marcelo Martí, Dr. Leo Gonzalez Gutierrez, Dr. Adrián Roitberg, Dr. Juan Bautista Hernando Vieites, Dr. Adrián Cristal

AUXILIARES: no tuvo

4.- CARRERA de DOCTORADO

5.- AÑO: 2012

CUATRIMESTRE/S: 1

6.- PUNTAJE PROPUESTO PARA CARRERA DE DOCTORADO: 2

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

8.- CARGA HORARIA SEMANAL:

Teóricas: n/c  
Problemas: n/c  
Laboratorio: 6hs  
Seminarios: n/c  
Teórico – Práctico: 30hs  
Salida a Campo: n/c

9.- CARGA HORARIA TOTAL: 72 hs

10.- FORMA DE EVALUACIÓN: 4 trabajos prácticos individuales y coloquio con profesor de cada uno de los cuatro módulos

11.- PROGRAMA ANALÍTICO:

48  
49  
50

## **Módulo 1: Métodos Numéricos sin malla**

- Unidad 1: Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos
  - Mecánica del continuo y definición de partícula fluida
  - Ecuaciones de conservación
  - Ecuaciones de estado
  - Disipación viscosa
- Unidad 2: Bases fundamentales del método SPH
  - Convolución SPH y propiedades fundamentales
  - Diferenciación SPH
  - Interpolación SPH
  - Versión SPH de las ecuaciones de Navier-Stokes
- Unidad 3: Aspectos prácticos de las ecuaciones SPH.
  - Discretización temporal de las ecuaciones
  - Ordenación de las listas de partículas
  - ISPH: Incompressible SPH
  - Condiciones de contorno
  - Tratamiento de la superficie libre
- Unidad 4: Aplicaciones I
  - Problemas de Pouseuille y Couette
  - Dam break problem
  - Difusión de vórtices
- Unidad 5: Aplicaciones II navales y oceánicas.
  - Sloshing tanks
  - Inundaciones y presiones de impacto en containers
  - Estabilidad de buques
- Suplemento Opcional: Extensión del método SPH a la simulación de sólidos.
  - Interacción fluido estructura.
  - Presencia de mamparos en tanques de sloshing.

## **Módulo 2: Herramientas de HPC en Bioinformática**

- Unidad 1: Dinámica molecular
  - Escala de tiempo
  - Hipótesis Ergódica
  - Campos de fuerza
  - Parametrización
  - Condiciones periódicas de borde (PBC)
  - Métodos de energía libre
- Unidad 2. Dinámica molecular - Aplicación de GPGPU para acelerar el cálculo.
  - Comunicación entre procesos (MPI)
  - Ventajas de utilizar GPGPU
  - Problemas para utilizar GPGPU
  - Modelos de precisión (DP/SP)
  - Performance comparativa con CPU

SF

gm.

UB

Unidad 3. Reactividad química en sistemas biológicos (QM/MM) y aplicación de GPGPU para la resolución de problemas.

- Nociones básicas de Mecánica cuántica
- Métodos QM
- Métodos QM/MM
- Implementación de un código en CUDA

Unidad 4. Técnicas de muestreo avanzadas para dinámica molecular.

- El problema del muestreo
- Energía libre
- Entropía
- Umbrella sampling
- Desigualdad de Jarzynski
- Replica Exchange
- Integración termodinámica

### **Módulo 3: Visualización**

Introducción

- Definición y objetivos de la Visualización
- Modelo de flujo de datos
- Clases de visualización

Introducción a la Infomática Gráfica 3D

- Modelo de cámara
- El cauce gráfico
- Modelado de objetos y primitivas gráficas
- Transformaciones lineales y afines en espacios 3D
- Proyección perspectiva
- Iluminación local
- Texturas
- Aliasing
- Introducción a la programación de shaders con GLSL

Técnicas de visualización

- Representaciones de datos
- Campos escalares, isosuperficies
- Renderizado de volúmenes
- Campos vectoriales
- Tensores

Renderizado paralelo y de datos masivos

- Motivaciones
- Técnicas de visualización de datos masivos
- Renderizado paralelo: tipos
- Composición de imágenes en paralelo (direct-send, binary swap)
- Herramientas: Equalizer

SF YH UB

Introducción a VTK  
Modelo programación y ejecución  
Ejemplos de uso.

#### **Módulo 4: Otros modelos de paralelismo**

Unidad 1: Introducción a la computación paralela  
Ley de Moore  
Problemas tecnológicos  
Hacia los Chips Multiprocessors  
Nuevos retos  
Pthreads/OpenMP, modelos de programación

Unidad 2: OmpSs  
Motivation & goals  
OmpSs: OpenMP + extensions  
Execution Model  
Memory Model  
Asynchronous calls  
Dependency clauses  
Examples  
GPUs and multiple cores

Unidad 3: New parallel programming models  
Compile-time Tool to support (S)TM  
Automatic Code Transformation  
Extensions to OpenMP  
Correct TM: Liveness  
Hardware Cache Coherence  
Transaction Cache  
Transactional Memory Coherence and Consistency  
Parallelization Methodology

Unidad 4: Otros modelos, CILK++  
cilk\_for  
Reducers  
Holders  
Funciones

#### 12.- BIBLIOGRAFÍA:

J.J. Monaghan, "An introduction to SPH". Computer Physics Communications, vol. 48, pp. 88-96, 1988.

W. G. Hoover, "Smooth Particle Applied Mechanics: The State of the Art", World Scientific, 2006.

SF PH UB

- R. F. Stellingwerf and C. A. Wingate, "Impact Modelling with SPH", Memorie della Societa Astronomia Italiana, Vol. 65, p.1117, 1994.
- L. Delorme. "Sloshing Flows. Experimental Investigation and Numerical Simulations with Smoothed Particle Hydrodynamics", Tesis doctoral. Universidad Politécnic de Madrid, 2007.
- P. Español, M.Revenga. "Smoothed dissipative particle dynamics". Physical Review E, 67. 2003.
- A. Colagrossi, "A meshless lagrangian method for free-surface and interface flows with fragmentation", PhD thesis, Universita di Roma La Sapienza, 2004.
- S. Cummins and M. Rudman, "An SPH projection method", J. Comp. Phys. 152 (2),584-607, 1999.
- X. Hu and N. A. Adams, "Angular-momentum conservative smoothed particle hydrodynamics for incompressible viscous flows", Phys. of Fl. 18, 702-706, 2006
- J.J. Monaghan, "Simulating free surface flows with SPH", J. Comp. Phys. 110 (2),39-406, 1994.
- Andrew Leach. "Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition)". Prentice Hall, 2001.
- Tomas Akenine-Möller, Eric Haines, Naty Hoffman. A.K. Peters. "Real time rendering (3a edición)". 2008
- Charles D. Hansen, Chris R. Johnson. "The Visualization Handbook". Elvesier, 2004
- Will Schroeder, Ken Martin, Bill Lorensen. "The Visualization Toolkit: An Object-Oriented Approach to 3D Graphics 4th ed". Kitware, 2006
- Tim Harris (Author), James Larus (Author), Ravi Rajwar (Author), Mark Hill "Transactional Memory", 2nd Edition. Morgan and Claypool Publishers
- Kiyofumi Sugawara. Parallel programming language for Cilk-C has come of / C ++ programmer (2011). Tol"kyol": Kattoshisutemu





Dra. VERÓNICA BECHER  
DIRECTORA ADJUNTA  
Depto. COMPUTACIÓN  
FCE y N - UBA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 505.487/15

Buenos Aires,

16 NOV 2015

**VISTO:**

la nota presentada por la Dra. Verónica Becher, Directora Adjunta del Departamento de Computación, mediante la cual eleva la información y el programa del curso de posgrado **Herramientas de HPC y aplicaciones**, que fue dictado en el año 2012 por el Dr. Adrián Turjansky con la colaboración de los Dres. Marcelo Martí, Leo González Gutiérrez, Adrián Roitberg, Juan Bautista Hernando Vieites y Adrián Cristal,

**CONSIDERANDO:**

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Postgrado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
RESUELVE:**

**Artículo 1°:** Dar validez al dictado del curso de posgrado **Herramientas de HPC y aplicaciones** de 72 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Herramientas de HPC y aplicaciones**, obrante a fs 3 a 6 del expediente de la referencia.


**Artículo 3°:** Aprobar un puntaje máximo de dos (2) punto para la Carrera del Doctorado.

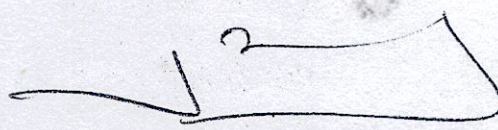
**Artículo 4°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Computación, a la Biblioteca de la FCEyN (con fotocopia del programa incluido) y a la Secretaría de Postgrado (sin fotocopia del programa). Cumplido Archívese.

2938

RESOLUCION CD N° \_\_\_\_\_

SP/iga 27/07/2015

  
Dr. PABLO J. PAZOS  
Secretario Adjunto de Posgrado  
FCEyN - UBA

  
Dr. JUAN CARLOS REBORADA  
DECANO