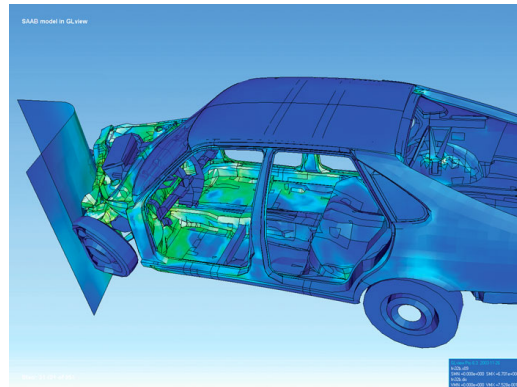


Computación científica

Descripción general de la asignatura

La Computación Científica trata sobre el uso de los computadores para resolver problemas científicos y de ingeniería. Un caso típico es realizar una simulación por computador de un sistema físico, bien sea un fenómeno natural (el clima, los movimientos sísmicos, la estructura de la materia, etc.) o un producto de ingeniería (un coche, un edificio, un microchip, un reactor nuclear, etc.), con el objetivo de poder realizar experimentación virtual con dichos modelos de ordenador. Esto es vital en el diseño de nuevos productos, así como en el ámbito de la investigación científica.



En la Computación Científica convergen diversas disciplinas: la informática, la matemática (métodos numéricos) y la disciplina asociada a la aplicación (física, biología, etc.). La asignatura se centra únicamente en los aspectos informáticos, principalmente en el diseño de software capaz de realizar simulaciones complejas. En estas simulaciones es necesario resolver problemas de gran dimensión (sistemas de ecuaciones de millones de incógnitas), para lo cual es necesario combinar algoritmos y estructuras de datos específicamente diseñados para ello, y a menudo aplicar técnicas de computación paralela.

La asignatura presenta los conceptos teóricos básicos que hacen falta mínimamente, y se centra sobre todo en aspectos prácticos (implementación de aplicaciones). Para ello, la metodología gira en torno al aprendizaje de PETSc, una biblioteca software orientada a objetos que ofrece implementaciones paralelas de las estructuras de datos más utilizadas, así como multitud de métodos para diferentes tipos de problemas. PETSc puede utilizarse desde C/C++, Fortran y Python, en diferentes plataformas (desde ordenadores personales con procesador multi-núcleo y GPUs hasta los más grandes supercomputadores).

Conocimientos recomendados

Se recomienda tener conocimientos básicos de programación paralela; es suficiente con lo estudiado en la asignatura “Computación Paralela” de tercer curso de la titulación. La dinámica de las clases, prácticas, evaluación, etc. será muy similar a la de dicha asignatura. También se hará uso del cluster de computación utilizado en las prácticas de la asignatura “Computación Paralela”.

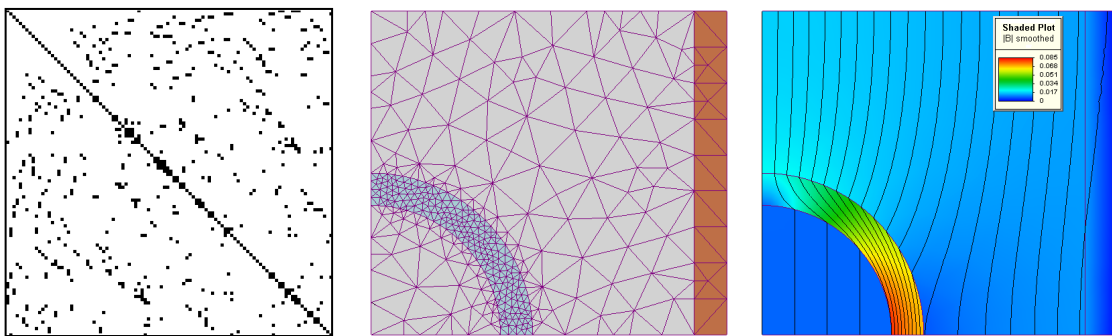
Unidades didácticas

1. Introducción

Se hace un repaso de las diferentes aplicaciones de la computación científica, en ámbitos como la bioingeniería, electromagnetismo, meteorología, geofísica, astrofísica, dinámica de fluidos, etc., así como el esquema general de resolución.

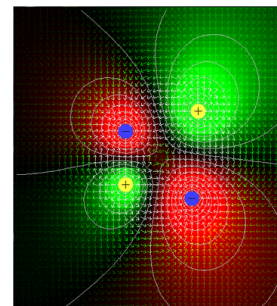
2. Estructuras de datos

En computación científica es necesario manejar grandes volúmenes de datos, procedentes de diversas fuentes (información geográfica, sensores, imagen médica), junto con los datos generados por la propia aplicación. En cualquier caso es necesario utilizar estructuras de datos apropiadas, que sean eficientes en cuanto a memoria y también en relación a los algoritmos que las utilizan. Destaca el almacenamiento de forma distribuida entre varios procesadores de matrices dispersas y vectores (objetos Mat y Vec de PETSc). Los vectores almacenan las magnitudes del problema, y se usan técnica de visualización para representarlas.

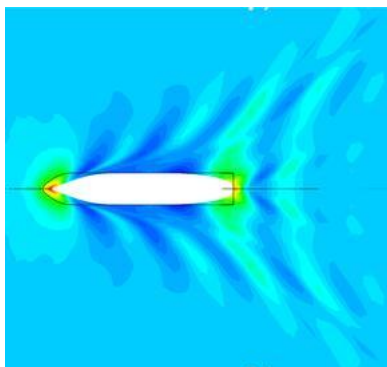


3. Procesos que no cambian con el tiempo (estacionarios)

En muchas aplicaciones interesa estudiar cuál es el estado estacionario (o de equilibrio) de un sistema, en problemas de electrostática, atracción gravitatoria, ingeniería mecánica, dinámica de fluidos, y en general cualquier proceso cuyas magnitudes no cambian con el tiempo. Para abordar estos problemas suele ser necesario plantear un sistema de ecuaciones de gran tamaño. En este tema se estudia la resolución de sistemas lineales (objeto KSP de PETSc) y se introduce brevemente el caso no lineal.



4. Procesos que evolucionan con el tiempo



Al modificar las condiciones en un sistema en equilibrio, el sistema evoluciona hacia una nueva configuración. Las magnitudes varían con el tiempo, por ejemplo la temperatura de una placa metálica al aplicar calor en su punto central. Otro ejemplo es la propagación de ondas (acústicas, electromagnéticas, en fluidos). La estrategia de resolución consiste en calcular la solución en un instante dado a partir de las soluciones anteriores (objeto TS de PETSc), siendo necesario resolver un sistema de ecuaciones en cada paso de tiempo.