Guia docent
250970 - DESDOMCOM - Descomposició de Dominis i Computació a Gran Escala

Última modificació: 28/03/2024

Unitat responsable: Escola Tècnica Superior d'Enginyeria de Camins, Canals i Ports de Barcelona
Unitat que imparteix: 751 - DECA - Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental.

Titulació: MÀSTER UNIVERSITARI EN MÈTODES NUMÈRICS EN ENGINYERIA (Pla 2012). (Assignatura obligatòria). MÀSTER UNIVERSITARI ERASMUS MUNDUS EN MECÀNICA COMPUTACIONAL (Pla 2013). (Assignatura optativa).

Curs: 2023 **Crèdits ECTS:** 5.0 **Idiomes:** Anglès

PROFESSORAT

Professorat responsable: RICCARDO ROSSI BERNECOLI

Altres: POOYAN DADVAND, RICCARDO ROSSI BERNECOLI

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:
8378. Coneixements de modelització numèrica pràctica. Capacitat per adquirir coneixements en modelització numèrica avançada aplicada a diferents àrees de l'enginyeria tals com: o enginyeria civil i mediambiental o enginyeria mecànica i aeroespacial o Nanoenginyeria i bioenginyeria o enginyeria naval i marina, etc
8379. Coneixements de l'estat de l'art en algoritmes numèrics. Capacitat per posar-se al dia en les últimes tecnologies numèriques per a la resolució de problemes d'enginyeria i ciències aplicades.
8380. Coneixements de modelització de materials. Capacitat per adquirir els coneixements relatius als models físics moderns de ciència de materials (models constitutius avançats) en mecànica de sòlids i de fluids.
8382. Experiència en simulacions numèriques. Adquisició de soltesa en les eines de simulació numèrica modernes i la seva aplicació en problemes multidisciplinaris d'enginyeria i ciències aplicades.
8383. Interpretació de models numèrics. Comprendre l'aplicabilitat i les limitacions de les diferents tècniques de càlcul per ordinador.
8384. Experiència en la programació de mètodes de càlcul. Capacitat per adquirir formació en el desenvolupament i utilització de programes de càlcul existents, així com de pre i post processadors, coneixement de llenguatges de programació i de llibreries de càlcul estàndard.

METODOLOGIES DOCENTS

L'assignatura consta de 0,5 hores a la setmana de classes presencials a l'aula (grup gran) i 1.5 hora setmanal amb la meitat de l'estudiantat (grup mitjà).

Es dediquen a classes teòriques 1,5 hores en grup gran, en què el professorat exposa els conceptes i materials bàsics de la matèria, presenta exemples i realitza exercicis.

Es dedica 1 hora (grup mitjà), a la resolució de problemes amb una major interacció amb l'estudiantat. Es realitzen exercicis pràctics per tal de consolidar els objectius d'aprenentatge generals i específics.

La resta d'hores setmanals es dedica a pràctiques de laboratori.

S'utilitza material de suport en format de pla docent detallat mitjançant el campus virtual ATENEA: continguts, programació d'activitats d'avaluació i d'aprenentatge dirigit i bibliografia.

Tot i que la majoria de les sessions s'impartiran en l'idioma indicat a la guia, potser les sessions en què es compti amb el suport d'altres experts convidats puntualment es duguin a terme en un altre idioma.

OBJECTIUS D'APRENENTATGE DE L'ASSIGNATURA

Aquest curs proporciona a l'estudiant amb diferents eines numèriques per a la solució de grans elements lineals que són el resultat de la discretització d'equacions diferencials parcials en màquines de memòria distribuïda a gran escala (super ordinadors). Ens centrarem primordialment en els mètodes iteratius de subespais de Krylov i precondicionants de descomposició de dominis. L'estudiant a més s'apropará per primera vegada a la computació paral·lela, programació multi-threaded(OpenMP), i programació message-passing (MPI).

* Entendre els beneficis i limitacions de solutores directes i iteratius dispersos

* Comprendre la importància de precondicionadors, i el seu impacte en el rendiment computacional dels solutores

* Entendre com definir / implementar precondicionadors que exploten de manera eficient concurrència (superordinadors)

* Entendre els diferents tipus d'escalabilitat i les principals característiques que un algorisme ha de tenir per tal de ser escalable

* Entendre els algoritmes de descomposició de dominis, les seves propietats i limitacions

* Estar familiaritzat amb la programació multi-threading (OpenMP) i la programació de message passing (MPI)

* Poder implementar solutores paral · lels OpenMP / MPI basat en precondicionadors de descomposició de dominis i solutores iteratius dels subespais de Krylov

* Preliminars -Discretitzación de elements finits
* Preliminars - Introducció a l'algebra numérica lineal
* Algoritmes de descomposició de dominis
* Algoritmes de descomposició de balanç de dominis
* Computació d'alt rendiment

REFERÈNCIES
==========

Domain Decomposition Algorithms
A. Toselli and O. Widlund. Springer, 2005

Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations
B. Smith, P. Bjorstad, and W. Gropp. Cambridge University Press, 2004

Finite Elements and Fast Iterative Solvers
H. Elman, D. Silvester, A. Wathen. Oxford Science Publications, 2006

Iterative Methods for Sparse Linear Systems
Y. Saad. SIAM books, 2006

Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method.
C. Johnson. Dover, 2009

The Sourcebook of Parallel Computing
J. Dongarra, I. Foster, G. C. Fox, W. Gropp, K. Kennedy, L. Torczon, A. White.
Morgan Kaufmann, 2003.

Introduction to High-Performance Scientific Computing
Victor Eijkhout, Edmond Chow, R. van de Geijn. lulu publications, 2011.

Scientific Parallel Computing
L. R. Scott, T. Clark, and B. Bagheri.
Princeton University Press, 2005.

Numerical Linear Algebra on High-Performance Computers

J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen, H. A. van der Vorst. SIAM books, 1998.

Aquest curs proporciona a l'estudiant amb diferents eines numèriques per a la solució de grans elements lineals que són el resultat de la discretització d'equacions diferencials parcials en màquines de memòria distribuïda a gran escala (super ordinadors). Ens centrarem primordialment en els mètodes iteratius de subespais de Krylov i precondicionants de descomposició de dominis. L'estudiant a més s'aproparà per primera vegada a la computació paral·lela, programació multi-threaded(OpenMP), i programació message-passing (MPI).

* Entendre els beneficis i limitacions de solutores directes i iteratius dispersos * Comprendre la importància de precondicionadors, i el seu impacte en el rendiment computacional dels solutores * Entendre com definir / implementar precondicionadors que exploten de manera eficient concurrència (superordinadors) * Entendre els diferents tipus d'escalabilitat i les principals característiques que un algorisme ha de tenir per tal de ser escalable * Entendre els algoritmes de descomposició

HORES TOTALS DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup gran	25,5	20.38
Hores grup mitjà	9,8	7.83
Hores grup petit	9,8	7.83
Hores aprenentatge autònom	80,0	63.95

Dedicació total: 125.1 h

CONTINGUTS

PRELIMINARS

Descripció:
Course Introduction
1.1 Matrix factorizations and inverses
1.2 QR & SVD
1.3 Eigenvalues of a matrix
1.4 Condition number
1.5 Ill-conditioning
1.6 Conditioning of the mass matrix
1.7 Conditioning of the Laplacian matrix
1.1 Mètode de penalització
1.2 Multiplicadors de Lagrange
1.3 Restriccions de diversos punts
1.1 Gradient conjugat 1.2 GMRES 1.3 Altres 1.4 Mètodes lliures de matrius 1.5 Enfocaments de Newton-Krylov
1.1 - Precondicionador en diagonal
1.2 - Precondicionador tipus ILU
1.3 - AMG

Dedicació: 33h 36m
Grup gran/Teoria: 14h
Aprenentatge autònom: 19h 36m

HIGH PERFORMANCE COMPUTING

Descripció:
4.1 Arquitectures paral·leles (memòria compartida vs distribuïda)
4.2 Eficiència paral·lela
4.3 Paradigmes de programació (OpenMP vs MPI)
4.4 Estructures de dades en àlgebra lineal numèric
4.5 Implementació d'operacions simples en MPI
4.6 Assignatures HPC

Dedicació: 38h 24m
Grup petit/Laboratori: 16h
Aprenentatge autònom: 22h 24m

BALANCING DOMAIN DECOMPOSITION ALGORITHMS

Descripció:
2.1 Motivation of DDM
2.1.1 Overlapping approach
2.1.2 Nonoverlapping approach
2.2 Overlapping subdomain algorithms
2.2.1 Additive Schwarz algorithms
2.2.2 Multiplicative Schwarz algorithms
2.3 Nonoverlapping subdomain algorithms
2.3.1 Dirichlet-Neumann
2.3.2 Neumann-Neumann
2.3.3 The case of many subdomains
3.1 Coarse level algorithms
3.2 Balancing Neumann-Neumann
3.3 BDDC
3.4 Implementation aspects
3.5 Numerical experimentation
3.6 Further topics
FINAL ASSIGNMENT

Dedicació: 36h
Grup gran/Teoria: 9h
Grup mitjà/Pràctiques: 6h
Aprenentatge autònom: 21h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

La qualificació de l'assignatura s'obté a partir de les qualificacions d'avaluació continuada i de les corresponents de laboratori i/o aula informàtica.

L'avaluació continuada consisteix a fer diferents activitats, tan individuals com de grup, de caràcter additiu i formatiu, realitzades durant el curs (dins de l'aula i fora d'aquesta).

La qualificació d'ensenyaments al laboratori és la mitjana de les activitats d'aquest tipus.

Les proves d'avaluació consten d'una part amb qüestions sobre conceptes associats als objectius d'aprenentatge de l'assignatura pel que fa al coneixement o la comprensió, i d'un conjunt d'exercicis d'aplicació.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Si no es realitza alguna de les activitats de laboratori o d'avaluació contínua en el periode programat, es considerarà com a puntuació zero.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Toselli, A.; Widlund, O.B. Domain decomposition methods : algorithms and theory [en línia]. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005 [Consulta: 08/02/2021]. Disponible a: http://dx.doi.org/10.1007/b137868. ISBN 3540206965.
- Smith, B.; Bjorstad, P.; Gropp, W.D. Domain decomposition : parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. ISBN 052149589X.
- Elman, H.C.; Silvester, D.J.; Wathen, A.J. Finite elements and fast iterative solvers : with applications in incompressible fluid dynamics. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 2014. ISBN 9780199678808.