Guía docente
250970 - DESDOMCOM - Descomposición de Dominios y Computación a Gran Escala

Última modificación: 28/03/2024

Unidad responsable: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos de Barcelona
Unidad que imparte: 751 - DECA - Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental.

Titulación: MÁSTER UNIVERSITARIO EN MÉTODOS NUMÉRICOS EN INGENIERÍA (Plan 2012). (Asignatura obligatoria). MÁSTER UNIVERSITARIO ERASMUS MUNDUS EN MECÁNICA COMPUTACIONAL (Plan 2013). (Asignatura optativa).

Curso: 2023 **Créditos ECTS:** 5.0 **Idiomas:** Inglés

PROFESORADO

Profesorado responsable: RICCARDO ROSSI BERNECOLI

Otros: POOYAN DADVAND, RICCARDO ROSSI BERNECOLI

COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN A LAS QUE CONTRIBUYE LA ASIGNATURA

Específicas:
8378. Conocimientos de modelización numérica práctica. Capacidad para adquirir conocimientos en modelización numérica avanzada aplicada a distintas áreas de la ingeniería tales como: o Ingeniería civil y medioambiental o Ingeniería mecánica y aeroespacial o Nanoingeniería y bioingeniería o Ingeniería naval y marina, etc.
8379. Conocimientos del estado del arte en algoritmos numéricos. Capacidad para ponerse al día en las últimas tecnologías numéricas para la resolución de problemas de ingeniería y ciencias aplicadas.
8380. Conocimientos de modelización de materiales Capacidad para adquirir los conocimientos relativos a los modelos físicos modernos de ciencia de materiales (modelos constitutivos avanzados) en mecánica de sólidos y de fluidos.
8382. Experiencia en simulaciones numéricas. Adquisición de soltura en las herramientas de simulación numérica modernas y su aplicación en problemas multidisciplinares de ingeniería y ciencias aplicadas.
8383. Interpretación de modelos numéricos. Comprender la aplicabilidad y las limitaciones de las distintas técnicas de cálculo por ordenador.
8384. Experiencia en la programación de métodos de cálculo. Capacidad para adquirir formación en el desarrollo y utilización de programas de cálculo existentes, así como de pre y post procesadores, conocimiento de lenguajes de programación y de librerías de cálculo estándar.

METODOLOGÍAS DOCENTES

La asignatura consta de 1,5 horas a la semana de clases presenciales en un aula (grupo grande) y 1.5 hora semanal con la mitad de los estudiantes (grupo mediano).

Se dedican a clases teóricas 1,5 horas en un grupo grande, en él que el profesorado expone los conceptos y materiales básicos de la materia, presenta ejemplos y realiza ejercicios.

Se dedica 1 hora (Grupo mediano), a la resolución de problemas con una mayor interacción con los estudiantes. Se realizan ejercicios prácticos con el finde consolidar los objetivos de aprendizaje generales y específicos.

El resto de horas semanales se dedica a prácticas de laboratorio.

Se utiliza material de apoyo en formato de plan docente detallado mediante el campus virtual ATENEA: contenidos, programación de actividades de evaluación y de aprendizaje dirigido y bibliografía.

Aunque la mayoría de las sesiones se impartirán en el idioma indicado en la guía, puede que las sesiones en las que se cuente con el apoyo de otros expertos invitados puntualmente se lleven a cabo en otro idioma.

OBJETIVOS DE APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Este curso proporciona al estudiante con diferentes herramientas numéricas para la solución de grandes elementos lineales que son el resultado de la discretización de ecuaciones diferenciales parciales en máquinas de memoria distribuida a gran escala (super ordenadores). Nos centraremos primordialmente en los métodos iterativos de subespacios de Krylov y precondicionantes de descomposición de dominios. El estudiante además hará un primer acercamiento a computación paralela, programación multi-threaded (OpenMP), y programación message-passing (MPI).

* Entender los beneficios y limitaciones de solutores directos e iterativos dispersos

* Comprender la importancia de precondicionadores, y su impacto en el rendimiento computacional de los solutores

* Entender cómo definir / implementar precondicionadores que explotan de manera eficiente concurrencia (superordenadores)

* Entender los diferentes tipos de escalabilidad y las principales características que un algoritmo debe tener al fin de ser escalable

* Entender los algoritmos de descomposición de dominios, sus propiedades y limitaciones

* Estar familiarizado con la programación multi-threading (OpenMP) y la programación de message passing (MPI)

* Poder implementar solutores paralelos OpenMP / MPI basado en precondicionadores de descomposición de dominios y solutores iterativos de los subespacios de Krylov

* Preliminares -Discretización de elementos finitos
* Preliminares - Introducción al algebra numérica lineal
* Algoritmos de descomposición de dominios
* Algoritmos de descomposición de balance de dominios
* Computación de alto rendimiento
REFERENCIAS
==========

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.

Este curso proporciona al estudiante con diferentes herramientas numéricas para la solución de grandes elementos lineales que son el resultado de la discretización de ecuaciones diferenciales parciales en máquinas de memoria distribuida a gran escala (super ordenadores). Nos centraremos primordialmente en los métodos iterativos de subespacios de Krylov y precondicionants de descomposición de dominios. El estudiante además acercará por primera vez en la computación paralela, programación multi-threaded (OpenMP), y programación message-passing (MPI). * Entender los beneficios y limitaciones de solutores directos e iterativos dispersos * Comprender la importancia de precondicionadores, y su impacto en el rendimiento computacional de los solutores * Entender cómo definir / implementar precondicionadores que explotan de manera eficiente concurrencia (superordenadores) * Entender los diferentes tipos de escalabilidad y las principales características que un algorit

HORAS TOTALES DE DEDICACIÓN DEL ESTUDIANTADO

Tipo	Horas	Porcentaje
Horas grupo pequeño	9,8	7.83
Horas grupo grande	25,5	20.38
Horas grupo mediano	9,8	7.83
Horas aprendizaje autónomo	80,0	63.95

Dedicación total: 125.1 h

CONTENIDOS

PRELIMINARES

Descripción:
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 Método de penalización
1.2 Multiplicadores de Lagrange
1.3 Restricciones multipunto
1.1 Gradiente conjugado 1.2 GMRES 1.3 Otros 1.4 Métodos libres de matriz 1.5 Enfoques de Newton-Krylov
1.1 - Precondicionamiento diagonal
1.2 - Precondicionamiento tipo ILU
1.3 - AMG

Dedicación: 33h 36m
Grupo grande/Teoría: 14h
Aprendizaje autónomo: 19h 36m

HIGH PERFORMANCE COMPUTING

Descripción:
4.1 Arquitecturas paralelas (memoria compartida vs distribuida)
4.2 Eficiencia paralela
4.3 Paradigmas de programación (OpenMP vs MPI)
4.4 Estructuras de datos en álgebra lineal numérica
4.5 Implementación de operaciones simples en MPI
4.6 Asignaciones HPC

Dedicación: 38h 24m
Grupo pequeño/Laboratorio: 16h
Aprendizaje autónomo: 22h 24m

BALANCING DOMAIN DECOMPOSITION ALGORITHMS

Descripción:
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

Dedicación: 36h
Grupo grande/Teoría: 9h
Grupo mediano/Prácticas: 6h
Aprendizaje autónomo: 21h

SISTEMA DE CALIFICACIÓN

La calificación de la asignatura se obtiene a partir de las calificaciones de evaluación continuada y de las correspondientes de laboratorio y/o aula informática.

La evaluación continua consiste en hacer diferentes actividades, tanto individuales como de grupo, de carácter aditivo y formativo, realizadas durante el curso (dentro del aula y fuera de ella).

La calificación de enseñanzas en el laboratorio es la media de las actividades de este tipo.

Las pruebas de evaluación constan de una parte con cuestiones sobre conceptos asociados a los objetivos de aprendizaje de la asignatura en cuanto al conocimiento o la comprensión, y de un conjunto de ejercicios de aplicación.

NORMAS PARA LA REALIZACIÓN DE LAS PRUEBAS.

Si no se realiza alguna de las actividades de laboratorio o de evaluación continua en el periodo programado, se considerará como puntuación cero.

BIBLIOGRAFÍA

Básica:

- Toselli, A.; Widlund, O.B. Domain decomposition methods : algorithms and theory [en línea]. 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.