

# Guia docent

## 270647 - SCA - Supercomputació per Aplicacions Exigents

Última modificació: 20/07/2020

**Unitat responsable:** Facultat d'Informàtica de Barcelona  
**Unitat que imparteix:** 701 - DAC - Departament d'Arquitectura de Computadors.  
**Titulació:** MÀSTER UNIVERSITARI EN INNOVACIÓ I RECERCA EN INFORMÀTICA (Pla 2012). (Assignatura optativa).  
**Curs:** 2020      **Crèdits ECTS:** 6.0      **Idiomes:** Anglès

### PROFESSORAT

---

**Professorat responsable:** DANIEL JIMENEZ GONZALEZ  
**Altres:** Primer quadrimestre:  
CARLOS ALVAREZ MARTINEZ - 10  
DANIEL JIMENEZ GONZALEZ - 10  
JOSEP LARRIBA PEY - 10

### CAPACITATS PRÈVIES

---

Comprensió bàsica de les arquitectures paral·leles, inclosos els sistemes multiprocessador de memòria compartida i distribuïda.

Habilitats de programació útils d'algun model de programació paral·lela.

### COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

---

#### Específiques:

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

#### Genèriques:

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

### METODOLOGIES DOCENTS

---

Durant el curs es realitzaran dos tipus d'activitats:

- Activitats centrades en l'adquisició de coneixements teòrics.
- Activitats centrades en l'adquisició de coneixements mitjançant experimentació amb la implementació i avaluació empírica al laboratori dels mecanismes explicats a nivell teòric.

Les activitats teòriques inclouen classes expositives participatives on s'expliquen els continguts bàsics del curs. Les activitats pràctiques inclouen seminaris de laboratori emprant l'ordinador portàtil de l'alumne/a, on els alumnes implementen els mecanismes descrits a les classes expositives. Els seminaris requereixen d'una preparació prèvia mitjançant la lectura de l'enunciat i la documentació de suport, i una elaboració posterior de les conclusions obtingudes en un informe.



## OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

- 1.L'estudiant ha de ser capaç de comprendre la complexitat dels diferents algorismes, identificar les parts computacionalment intensives d'una simulació o processament de dades, i decidir quines parts necessiten optimitzar i paralelitzar-se.
- 2.L'estudiant ha de ser capaç de dissenyar i implementar algorismes eficients de simulació paral·lela i processament de dades usant un model de programació paral·lel.
- 3.L'estudiant ha de ser capaç d'avaluar els diferents compromisos (robustesa, cost computacional, escalabilitat) per a seleccionar un algoritme específic per a un problema de simulació o processament de dades

## HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores activitats dirigides	2,0	1.33
Hores aprenentatge autònom	96,0	64.00
Hores grup gran	52,0	34.67

**Dedicació total:** 150 h

## CONTINGUTS

### Introducció

**Descripció:**

Introducció: descripció general

- Reptes en Ciència i Enginyeria
- HPC = Algorismes + Arquitectura + Model de Programació
- Aplicacions numèriques i no numèriques
- Ordinadors paral·leles

### Introducció a les Simulacions numèriques

**Descripció:**

- De models a algorismes
- Discretització i PDE
- Diferències finites i elements finits
- Tipus de PDEs: el·líptiques, parabòliques, hiperbòliques
- Problemes de valor inicial i de valor límit
- Esquemes numèrics: Explícit vs Implícit
- Programari numèric: de BLAS, LAPACK, etc.

### Resolució de sistemes lineals d'equacions a gran escala

**Descripció:**

- Mètodes directes vs iteratius
- Fonamentals kernels interiors i formats de matriu
- Preconditioning
- Particionament i reordenació

### Casos Pràctics

**Descripció:**

- Models de programació en paral·lel
- Paral·lelisme i granularitat
- Paral·lelisme de blocs

### Introducció al nucli de DBMSs i l'execució de consultes en aquests sistemes

**Descripció:**

Aquest tema té com a objectiu comprendre les diferents capes de programari d'un DBMS i com interactuen, les diferents complexitats que encarnen i com la seva interacció determina el rendiment d'aquests SGBD. Les sessions inclouran discussions i preparació de treballs per part dels estudiants.

### Aplicacions de Big Data i bases de dades de grafs

**Descripció:**

Aquesta sessió té l'objectiu de presentar als estudiants el disseny d'aquests sistemes de base de dades Big Data i grafs, com es construeixen i com la seva estructura es veu influenciada per l'estructura de les seves diferents capes de programari. Aquestes sessions seran la base per a aquells estudiants que seleccionin aquesta part del curs per a la tasca pràctica.

### Benchmarking per a bases de dades

**Descripció:**

El benchmarking és un dels problemes més importants en el disseny i l'evolució de la base de dades. Aquesta part del curs serà dissenyada per comprendre els diferents esforços realitzats en benchmarking dels EUA i Europa per a bases de dades relacionals i grafs.

### Alineació de seqüència

**Descripció:**

Es tracta d'una forma d'ordenar les seqüències d'ADN, ARN o proteïna per identificar regions de semblança que poden ser conseqüència de relacions funcionals, estructurals o evolutius entre les seqüències. Les estratègies de cerca, puntuació i de paral·lelització són importants per superar aquest repte.

### Dinàmica molecular

**Descripció:**

Se trata de una simulación por ordenador de movimientos físicos de átomos y moléculas. Las técnicas de corte pueden ser importantes para reducir la complejidad de cálculo de este reto.

### Acoblament de proteïnes.

**Descripció:**

Es tracta d'un mètode que prediu l'orientació preferent d'una molècula a un segon quan està unida entre si per formar un complex estable. Hi ha diversos enfocaments que poden augmentar la precisió, però també la complexitat d'aquests mètodes.

## ACTIVITATS

### Introducció

**Descripció:**

Seguiu les conferències, estudeu els materials i les pràctiques.

**Objectius específics:**

1

**Competències relacionades:**

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

**Dedicació:** 2h

Grup gran/Teoria: 2h

### Numerical: Environment and Brief explanation of the tools to be used

**Dedicació:** 12h

Grup gran/Teoria: 2h

Activitats dirigides: 2h

Aprenentatge autònom: 8h

### Numerical: Programació paral·lela a blocs. Implementació i anàlisi.

**Dedicació:** 4h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 2h

### Numerical: Paral·lelització a blocs de complexitat mitja.

**Dedicació:** 6h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 4h



## Part I: Aplicacions Numèriques

### Descripció:

Seguiu les conferències, estudiï els materials i les pràctiques.

### Objectius específics:

1, 2, 3

### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.

**Dedicació:** 40h

Grup gran/Teoria: 10h

Aprenentatge autònom: 30h

## Lliurable: assignació en aplicacions numèriques

### Descripció:

Assignació per a la part d'Aplicacions Numèriques. Per ser lliurat en Racó.

### Objectius específics:

1, 2, 3

### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.



## Part II-a) Aplicacions no numèriques: Gestió Big Data

### Descripció:

Seguiu les conferències, estudiï els materials i les pràctiques.

### Objectius específics:

1, 2, 3

### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.

**Dedicació:** 42h

Grup gran/Teoria: 16h

Aprenentatge autònom: 26h

## Entregable: Problema en gestió Big Data

### Descripció:

Problema del mòdul de gestió Big Data. Es lliurarà a Racó o per correu electrònic.

### Objectius específics:

1, 2, 3

### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.



## Part II-b) Aplicacions no numèriques: Bioinformàtica

### Descripció:

Segueix les classes magistrals, estudia els materials i pràctiques

### Objectius específics:

1, 2, 3

### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.

### Dedicació: 20h

Grup gran/Teoria: 10h

Aprenentatge autònom: 10h

## Bioinformàtica: Anàlisi i paral·lelització d'una aplicació bioinformàtica

### Dedicació: 6h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 4h

## Bioinformàtica: Entorn i eines d'acceleració hardware

### Dedicació: 6h

Grup petit/Laboratori: 2h

Aprenentatge autònom: 4h

## Bioinformàtica: Acceleració d'una aplicació de bioinformàtica

### Dedicació: 12h

Grup petit/Laboratori: 4h

Aprenentatge autònom: 8h



### Lliurable: Problema en Bio-Informàtica

#### Descripció:

Problema del mòdul de Bio-informàtica. A entregar en el Racó.

#### Objectius específics:

1, 2, 3

#### Competències relacionades:

CG3. Capacidad para el modelado matemático, cálculo y diseño experimental en centros tecnológicos y de ingeniería de empresa, particularmente en tareas de investigación e innovación en todos los ámbitos de la Informática.

CG5. Capacidad para aplicar soluciones innovadoras y realizar avances en el conocimiento que exploten los nuevos paradigmas de la Informática, particularmente en entornos distribuidos.

CG1. Capacidad para aplicar el método científico en el estudio y análisis de fenómenos y sistemas en cualquier ámbito de la Informática, así como en la concepción, diseño e implantación de soluciones informáticas innovadoras y originales.

CEE3.3. Capacidad para entender las necesidades computacionales de problemas de disciplinas distintas de la informática y efectuar contribuciones significativas en equipos multidisciplinares que usen la computación.

CEE4.2. Capacidad de analizar, evaluar, diseñar y optimizar software considerando la arquitectura y de proponer nuevas técnicas de optimización.

CEC3. Capacitat per aplicar solucions innovadores i realitzar avanços en el coneixement que explotin els nous paradigmes de la Informàtica, particularment en entorns distribuïts.

## SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

El curs s'avaluarà amb un conjunt de tasques i un projecte final.

$$\text{Grau} = A1 / 3 + A2 / 3 + 0.A3 / 3$$

on

Ai: = Assignació i (i d'1 a 3)

## BIBLIOGRAFIA

### Bàsica:

- Burnett, D.S. Finite element analysis: from concepts to applications. Addison-Wesley, 1987. ISBN 0201108062.
- Chapra, S.C.; Canale, R.P. Numerical methods for engineers [en línia]. 7th ed. New York: McGraw-Hill, 2015 [Consulta: 24/11/2020]. Disponible a: [http://www.ingebook.com/ib/NPcd/IB\\_BooksVis?cod\\_primaria=1000187&codigo\\_libro=8100](http://www.ingebook.com/ib/NPcd/IB_BooksVis?cod_primaria=1000187&codigo_libro=8100). ISBN 9780073397924.
- Saad, Y. Iterative methods for sparse linear systems. 2nd ed. SIAM, 2003. ISBN 0898715342.
- Quinn, M.J. Parallel programming in C with MPI and OpenMP. International edition. McGraw-Hill, 2003. ISBN 0071232656.
- Briggs, W.L.; Henson, V.E.; McCormick, S.F. A multigrid tutorial. 2nd ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000. ISBN 0898714621.
- Sakr, S.; Pardede, E. Graph data management: techniques and applications. Information Science Reference, 2012. ISBN 9781613500538.
- Tramontano, A. The ten most wanted solutions in protein bioinformatics [en línia]. Chapman and Hall/CRC, 2005 Disponible a: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/upcatalunya-ebooks/detail.action?docID=264571>. ISBN 1584884916.
- Gray, J.; Reuter, A. Transaction processing: concepts and techniques. Morgan Kaufmann, 1993. ISBN 1558601902.

### Complementària:

- Cohen, G.C. Higher-order numerical methods for transient wave equations. Springer, 2001. ISBN 354041598X.
- Fichtner, A. Full seismic waveform modelling and inversion. Springer, 2011. ISBN 9783642158063.
- Wesseling, P. An introduction to multigrid methods. Edwards, 2004. ISBN 1930217080.





## RECURSOS

---

### Enllaç web:

- <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis/>. Mesh partitioner software
- <http://www.open-mpi.org/>. MPI library
- <http://openmp.org/>. OpenMP
- <http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/la-sw.html>. Freely Available Software for Linear Algebra
- <http://www.mgnet.org/>. MGNet
- <http://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/>. Graph partitioning, static mapping and clustering, mesh and hypergraph partitioning, and sparse matrix block ordering