

CESGA Computational Science Summer School 2011



Del 4 de julio al 30 de septiembre de 2011
CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA - CESGA
Santiago de Compostela

CURSOS	FECHAS	CURSOS	IMPARTE
Nivel Básico			
Introducción	04/07	INTRO	
Programación en Fortran	05/07- 08/07	PRF	Juan Touriño Domínguez (UDC)
Programación en C	11/07- 15/07	PRC	Juan Ángel Lorenzo del Castillo (USC)
Compilación, ejecución y optimización de programas científicos	18/07- 22/07	CEO	Patricia González Gómez (UDC)
Introducción a algoritmos de resolución de aplicaciones científicas	26/07-29/07	ALG	María Teresa Sánchez Rúa (CESGA)
Nivel Avanzado			
Introducción	29/08	INTRO	
Programación paralela utilizando directivas OpenMP	30/08-02/09	OMP	María José Martín Santamaría (UDC)
Introducción a la programación en MPI	05/09-09/09	MPI	Xulio López Albín (USC)
Herramientas de desarrollo de aplicaciones paralelas: Debugging y análisis del rendimiento	12/09-16/09	DEB	Gabriel Rodríguez Álvarez (UDC) Diego Rodríguez Martínez (USC)

Plazo de inscripción

Del 15 de marzo al 30 de abril
a través de la página web:

<http://www.cesga.es/SummerSchool2011>



Índice:

1	Introducción.....	2
2	Objetivos.....	2
3	Destinatarios.....	3
4	Fechas y lugar de celebración.....	3
5	Organización y financiación.....	4
6	Formación.....	5
7	Calendario.....	7
8	Solicitud de plaza.....	8
9	Programas de los cursos de formación.....	10

1 Introducción

Hoy en día, gran parte de la investigación científica implica el uso de ordenadores tanto como la teoría o la experimentación. La computación muchas veces supone una ayuda fundamental para la comprensión y profundización en el problema abordado, que no sería posible mediante otras herramientas. Con los ordenadores, los científicos pueden investigar problemas que antes eran imposibles de abordar por enormemente complejos, peligrosos, o por su consumo excesivo de tiempo, y obtener resultados casi instantáneamente.

La Ciencia Computacional es una disciplina científica interdisciplinar orientada a la solución de problemas científicos complejos mediante la utilización de modelos matemáticos, simulación numérica y computación.

El Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) es el centro de cálculo, comunicaciones de altas prestaciones y servicios avanzados de la Comunidad Científica Gallega, Sistema Académico Universitario y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Es uno de los centros de referencia en el área de Ciencia Computacional a nivel europeo, y cuenta entre sus máquinas con uno de los mayores supercomputadores de memoria compartida en Europa, *Finis Terrae*.

2 Objetivos

La **CESGA Computational Science Summer School 2011** pretende fomentar la actividad computacional dentro de la comunidad investigadora, especialmente en la resolución de problemas con grandes necesidades de computación. Se compone tanto de tareas formativas grupales y tutorizadas como de actividades de investigación voluntarias.

Los objetivos de la **CESGA Computational Science Summer School 2011** son los siguientes:

- Formar a licenciados, ingenieros, investigadores y programadores en técnicas de computación y nuevas herramientas de cálculo científico.
- Proporcionar capacitación en el desarrollo de aplicaciones científicas de cálculo intensivo.
- Proporcionar capacitación en la programación de aplicaciones de computación paralela.



3 Destinatarios

La **CESGA Computational Science Summer School 2011** está dirigida a licenciados, ingenieros, investigadores y programadores, tanto del ámbito académico como empresarial, que estén desarrollando soluciones de software en el ámbito científico-técnico, o que deseen mejorar su cualificación en ciencia computacional y desarrollar su carrera como programadores de aplicaciones científicas, de cálculo intensivo o en las que el rendimiento sea un aspecto crítico. Esta Summer School también está orientada a aquellos profesionales que quieran sacar el máximo rendimiento a las nuevas arquitecturas de procesadores.

Hay un máximo de **15 plazas** disponibles para esta tercera edición en 2011.

4 Fechas y lugar de celebración

Fechas: Del 4 de julio al 30 de septiembre de 2011.

Niveles:

- **Básico:** Del 4 al 29 de julio de 2011
- **Avanzado:** Del 29 de agosto al 16 de septiembre de 2011

Duración: 140 horas (Nivel Básico 80 horas; Nivel Avanzado 60 horas)

Lugar: Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), Av. de Vigo, s/n, Campus Sur, Santiago de Compostela (A Coruña), España.

Santiago de Compostela es una acogedora ciudad con más de 500 años de tradición universitaria. Declarada "Patrimonio de la Humanidad" en 1985 por la UNESCO, por su belleza urbana y su importancia como destino de una de las rutas culturales y espirituales más importantes del mundo, el Camino de Santiago.

5 Organización y financiación

Organiza: Centro de Supercomputación de Galicia

Contacto: ccsss11@cesga.es

Comité organizador:

- Iván González López del Castillo, Centro de Supercomputación de Galicia (Director)
- Fernando Bouzas Sierra, Centro de Supercomputación de Galicia.
- Andrés Gómez Tato, Centro de Supercomputación de Galicia.
- María José Rodríguez Malmierca, Centro de Supercomputación de Galicia, CESGA.
- María Teresa Sánchez Rúa, Centro de Supercomputación de Galicia
- Juan Touriño Domínguez, Departamento de Electrónica y Sistemas, Universidad de A Coruña.
- Francisco Fernández Rivera, Departamento de Electrónica y Computación, Universidad de Santiago de Compostela.

Colabora:

- Nodo CESGA del Proyecto i-MATH.

6 Formación

Contenido de los cursos:

La parte formativa de la **CESGA Computational Science Summer School 2011** está compuesta por siete cursos orientados a proporcionar formación en programación, optimización y depurado de aplicaciones científicas, tanto secuenciales como paralelas:

Nivel básico:

<i>Nombre del curso</i>	<i>Fechas</i>	<i>Acrónimo</i>
Acceso y utilización de recursos (Finis Terrae, SVGD) en el CESGA	04/07	INTRO
Programación en Fortran	05/07-08/07	PRF
Programación en C	11/07-15/07	PRC
Compilación, ejecución y optimización de programas científicos	18/07-22/07	CEO
Introducción a algoritmos de resolución de aplicaciones científicas	26/07-29/07	ALG

Nivel avanzado:

<i>Nombre del curso</i>	<i>Fechas</i>	<i>Acrónimo</i>
Acceso y utilización de recursos (Finis Terrae, SVGD) en el CESGA	29/08	INTRO
Programación paralela utilizando directivas OpenMP	30/08-02/09	OMP
Introducción a la programación en MPI	05/09-09/09	MPI
Herramientas de desarrollo de aplicaciones paralelas: Debugging y análisis del rendimiento	12/09-16/09	DEB

Formato de los cursos:

- Presencial, de 20 horas teórico/prácticas en sesiones de 4/5 horas (más descansos), con acceso adicional a una plataforma de e-learning para facilitar la interacción e intercambio de materiales.
- Cada alumno contará con una copia en papel y en formato electrónico de la documentación y ejercicios a realizar.
- Tutorías personalizadas realizadas por el profesorado y personal técnico del CESGA.
- Se dispondrá de un PC para cada alumno. Opcionalmente, se podrá trabajar con un portátil propio.
- Cada alumno dispondrá de cuenta de usuario en CESGA durante la celebración de la escuela para acceder a los distintos recursos del centro.

Profesorado:

- Grupo de Arquitectura de Computadores, Universidad de A Coruña.
- Grupo de Arquitectura de Computadores, Universidad de Santiago de Compostela.
- Centro de Supercomputación de Galicia CESGA.

<i>Nombre del curso</i>	<i>Profesor(es)</i>
Acceso y utilización de recursos en el CESGA (INTRO)	Carlos Fernández Sánchez (CESGA)
Programación en Fortran (PRF)	Juan Touriño Domínguez (UDC)
Programación en C (PRC)	Juan Ángel Lorenzo del Castillo (USC)
Compilación, ejecución y optimización de programas científicos (CEO)	Patricia González Gómez (UDC)
Introducción a algoritmos de resolución de aplicaciones científicas (ALG)	María Teresa Sánchez Rúa (CESGA)
Programación paralela utilizando directivas OpenMP (OMP)	María José Martín Santamaría (UDC)
Introducción a la programación en MPI (MPI)	Xulio López Albín (USC)
Herramientas de desarrollo de aplicaciones paralelas (DEB)	Gabriel Rodríguez Álvarez (UDC) Diego Rodríguez Martínez (USC)

7 Calendario

Nivel Básico:	INTRO / PRF / PRC / CEO / ALG
Nivel Avanzado:	INTRO / OMP / MPI / DEB

Lunes		Martes		Miércoles		Jueves		Viernes	
Julio 2011									
04:	Presentación	05:	PRF	06:	PRF	07:	PRF	08:	PRF
	INTRO								
11:	PRC	12:	PRC	13:	PRC	14:	PRC	15:	PRC
18:	CEO	19:	CEO	20:	CEO	21:	CEO	22:	CEO
25:		26:	ALG	27:	ALG	28:	ALG	29:	ALG
Agosto 2011									
29:	INTRO	30:	OMP	31:	OMP	01:	OMP	02:	OMP
	Prácticas Niv. Básico								
Septiembre 2011									
05:	MPI	06:	MPI	07:	MPI	08:	MPI	09:	MPI
12:	DEB	13:	DEB	14:	DEB	15:	DEB	16:	DEB
26:	Prácticas Niv. Avanz.	27:		28:		29:		30:	

Para obtener el diploma acreditativo de asistencia a la Summer School (Nivel Básico y/o Nivel Avanzado) será necesario justificar el 80% de horas de participación en los cursos de formación y entregar las prácticas correspondientes a cada uno de los cursos antes de las fechas indicadas:

- Nivel Básico: 29 de agosto de 2011.
- Nivel Avanzado: 26 de septiembre de 2011.

8 Solicitud de plaza

La **CESGA Computational Science Summer School 2011** cuenta con **15 plazas**. La inscripción se puede realizar a través de la página web <http://www.cesga.es/SummerSchool2011>.

Plazo de inscripción:

Del **15 de marzo** al **30 de abril** de 2011.

- Los alumnos pueden inscribirse en los distintos niveles independientemente.
- Tendrán preferencia en la concesión de plaza aquellos alumnos que se matriculen de la Summer School completa (Niveles Básico y Avanzado).
- La concesión de plazas se realizará por parte del Comité Organizador. Se notificará la concesión de plaza a los solicitantes antes del **15 de mayo** de 2011.

Cuotas de inscripción:

Nivel Básico:

	<i>Cuota de inscripción</i>
Investigador i-MATH	500€
Investigador Univ. Gallegas / CSIC / Red de Centro Tecnológicos de Galicia	500€
Otros	1200€

Nivel Avanzado:

	<i>Cuota de inscripción</i>
Investigador i-MATH	375€
Investigador Univ. Gallegas / CSIC / Red de Centro Tecnológicos de Galicia	375€
Otros	900€

Inscripción completa (Niveles Básico y Avanzado):

	<i>Cuota de inscripción</i>
Investigador i-MATH	700€
Investigador Univ. Gallegas / CSIC / Red de Centro Tecnológicos de Galicia	700€
Otros	1750€

La cuota de inscripción incluye todas las actividades formativas y la documentación correspondiente a los cursos de formación.

9 Programas de los cursos de formación

Programación en Fortran:

Del 5 al 8 de julio

El objetivo del curso consiste en formar al alumno en profundidad sobre la programación en el lenguaje Fortran 90/95. Su interés radica en su extendida utilización en el ámbito de la ciencia computacional y de la computación de altas prestaciones, tanto en lo que respecta a su uso en aplicaciones y bibliotecas científicas y de ingeniería, como a su elección como lenguaje base para lenguajes de programación paralela. El temario se complementará con la realización de prácticas dirigidas utilizando el compilador de Fortran 90/95 g95 (<http://g95.sourceforge.net>).

Temario:

1. Introducción al lenguaje Fortran 90/95
2. Tipos de datos:
 - Tipos de datos intrínsecos.
 - Parámetro KIND.
 - Tipos de datos derivados.
3. Control de flujo:
 - Bloque IF.
 - Bloque CASE.
 - Operadores lógicos y relacionales.
4. Bucles (DO, EXIT, CYCLE).
5. Arrays:
 - Notación de arrays.
 - Sentencia WHERE.
 - Arrays y tipos de datos derivados.
 - Arrays multidimensionales.
 - Funciones intrínsecas con arrays.

6. Entrada/Salida:

- Formatos para E/S.
- Descriptores de formato.
- Especificadores de E/S.
- Ficheros

7. Procedimientos:

- Funciones.
- Subrutinas.
- Argumentos de procedimientos (atributo INTENT).
- Procedimientos y arrays: arrays automáticos y assumed-shape.
- Variables locales (SAVE).
- Procedimientos internos.
- Recursividad.
- Paso de procedimientos como parámetro.
- Argumentos opcionales.

8. Módulos e Interfaces:

- Bloque INTERFACE.
- Definición y uso de módulos (MODULE).
- Restricciones de acceso en módulos (PUBLIC/PRIVATE).
- Definición de procedimientos genéricos.
- Definición de operadores.
- Extensión de procedimientos y operadores.

9. Memoria Dinámica: Punteros.

- Arrays dinámicos (ALLOCATABLE).
- Punteros y estructuras de datos dinámicas.

10. Principales Novedades en Fortran 95:

- Construcción FORALL.
- Procedimientos puros y elementales.

11. Introducción al Estándar Fortran 2003

Programación en C:

Del 11 al 15 de julio

El objetivo del curso es el de formar al alumno en profundidad sobre la programación en el lenguaje C. Su interés radica en su uso como herramienta de programación en ciencia computacional y de la computación de altas prestaciones, tanto en lo que respecta a su uso en aplicaciones y bibliotecas científicas y de ingeniería, como a su elección como lenguaje base para lenguajes de programación paralela como MPI y OpenMP. Se hará, por tanto, especial hincapié en los aspectos del lenguaje más relevantes para su uso en el ámbito de la computación de altas prestaciones. La orientación del curso es eminentemente práctica, por lo que se irán proponiendo ejercicios a los alumnos a medida que se vayan explicando los diferentes conceptos. Así mismo, se intercalarán laboratorios prácticos más extensos al final de algunas lecciones.

Temario:

1. Introducción:
 - Qué es y cómo funciona ANSI C.
 - Evolución histórica de C.
 - Estructura básica de un programa en C.
2. Declaraciones y expresiones:
 - Tipos de datos y variables.
 - Ámbito y visibilidad de las variables.
 - Constantes.
 - Operadores y expresiones.
3. Sentencias básicas en C:
 - Sentencias condicionales.
 - Sentencias de control de flujo.
4. Punteros y arrays:
 - Concepto de puntero y array.
 - Inicialización y acceso.
 - Arrays multidimensionales.

- Relación entre punteros y arrays.
 - Gestión dinámica de memoria.
5. Funciones:
- Estructura de una función.
 - Argumentos y valor de retorno.
 - La función main().
 - Funciones de manejo de caracteres.
 - Punteros a funciones.
6. Tipos avanzados:
- Estructuras.
 - Uniones.
 - Typedef.
 - Casting.
7. El preprocesador de C:
- Sustitución de strings.
 - Inclusión de ficheros fuente.
 - Macros.
8. Entrada/salida:
- Lectura y escritura por entrada/salida estándar.
 - Lectura y escritura de ficheros.

Compilación, ejecución y optimización de programas científicos

Del 18 al 22 de julio

El objetivo de este curso es mejorar la eficiencia de códigos computacionales.

Temario:

1. Visión general y organización del curso
2. Compilación y enlazado de programas:
 - Descripción del proceso de compilación y enlazado.
 - Compiladores C y Fortran.
 - Llamadas a subrutinas Fortran desde C y viceversa.
3. Utilización de librerías externas
 - Definición y uso de librerías.
 - Librerías matemáticas más populares.
 - Creación y manipulación de librerías propias.
4. Ejecución de programas científicos
 - Introducción al uso de las colas de ejecución.
 - Scripting. Aplicación a la parametrización de experimentos.
5. Técnicas de Optimización y Mejoras al Rendimiento
 - Aritmética del computador y sus implicaciones en computación científica.
 - Optimización del rendimiento desde el punto de vista de la jerarquía de memoria.
 - Otras optimizaciones del rendimiento.

Introducción a algoritmos de resolución de aplicaciones científicas:

Del 26 al 29 de julio

El objetivo de este curso es mostrar a los usuarios los métodos numéricos más apropiados para cada problema que pretendan resolver.

Temario:

1. Derivación e integración numérica.
2. Resolución de E.D.O: Métodos de Euler, Crank-Nicholson, Runge-Kutta.
3. Resolución de sistemas de ecuaciones lineales:
 - Métodos directos.
 - Métodos iterativos clásicos.
 - Métodos iterativos de descenso: Método de gradiente conjugado y GMRES.
 - Introducción a las técnicas de preconditionamiento.
 - Formatos de almacenamiento de matrices en el ordenador. Elección del formato en función del método empleado.
4. Resolución de sistemas de ecuaciones no lineales:
 - Métodos de punto fijo.
 - Métodos de Newton y quasi-Newton.
 - Método de Broyden.
5. Resolución de E.D.P.: método de diferencias finitas, método de elementos finitos.
6. Cálculo de autovalores y autovectores:
 - Método de la potencia.
 - Métodos iterativos: método de Rayleigh-Ritz, algoritmo de Lanczos.

Programación paralela utilizando directivas OpenMP:

Del 30 de agosto al 2 de septiembre

El objetivo del curso es proporcionar una visión completa y práctica de OpenMP (www.openmp.org), un conjunto de directivas estándar para la programación paralela de supercomputadores de memoria compartida.

Temario:

0. Conceptos previos
 - Jerarquía de memoria
 - Conceptos básicos de compilación
1. Introducción a la programación paralela
 - ¿Qué es la programación paralela?
 - Tipos de arquitecturas paralelas
 - Paradigmas de programación paralela
 - Medidas de rendimiento de programas paralelos
 - Programación paralela en el FT
 - Compilación y ejecución de programas en el FT
2. Especificación OpenMP
 - Introducción
 - Modelo de ejecución paralela
 - Modelo de memoria
 - Características principales del estándar OpenMP
 - Regiones paralelas: directiva PARALLEL
 - Directivas de reparto de trabajo
 - Directiva TASK
 - Directivas de sincronización
 - Directiva THREADPRIVATE
 - Biblioteca de rutinas OpenMP
 - Variables de entorno

3. Paralelización a nivel de lazo mediante OpenMP

- Pasos en la paralelización de un programa
- Lazos potencialmente paralelos
- Técnicas de reestructuración de código
- Consideraciones caché
- Sobrecarga de la paralelización
- Casos de estudio

4. Más información

- Benchmarking
- Otros compiladores
- Referencias

Introducción a la programación en MPI:

Del 5 al 9 de septiembre

El estándar de facto para la programación paralela según el paradigma de paso de mensajes es MPI. En este curso se pretende introducir al alumno en los detalles de este modelo de programación y ofrecerle una visión completa de las diferentes posibilidades que ofrece MPI. Se hará un especial hincapié en la componente práctica del aprendizaje, de modo que se introducirán ejemplos asociados a los conceptos y funciones más importantes. Finalmente se abordará la cuestión de la evaluación, depurado y optimización de los códigos paralelos desarrollados. El objetivo final es que el alumno comprenda el paradigma de programación de pase de mensajes, y adquiera conocimientos suficientes para desarrollar códigos paralelos eficientes usando MPI.

Temario:

1. Introducción.
2. MPI: conceptos generales.
3. Funciones de MPI básicas.
4. Comunicaciones colectivas.
5. Tipos de datos derivados.
6. Comunicadores.
7. Topologías.
8. Otros modos de comunicación.
9. Depurado de programas.
10. Introducción a MPI-2

Herramientas de desarrollo de aplicaciones paralelas: Debugging y análisis del rendimiento

Del 12 al 16 de septiembre

Debido al incremento del paralelismo implícito en el desarrollo de los actuales procesadores, la detección de fallos y la ejecución eficiente de los códigos paralelos se han convertido en un objetivo fundamental para satisfacer la creciente demanda de potencia de cómputo. Existen herramientas de análisis de rendimiento y debugging que ayudan a detectar los problemas existentes y proporcionan la información necesaria para resolverlos. En este curso se proporcionará una introducción a los conceptos de debugging y análisis de rendimiento de aplicaciones paralelas, mostrando al usuario las diferentes técnicas utilizadas. Así mismo, se mostrará el uso de herramientas representativas para mostrar las capacidades de este tipo de aproximaciones.

Temario:

1. Visión general y organización del curso.
2. Debugging de aplicaciones paralelas:
 - Aproximación sistemática al proceso de debugging.
 - Tipos de fallos de aplicaciones: fallos comunes, problemas de difícil detección, fallos de memoria.
 - Problemas específicos de aplicaciones paralelas: race conditions, interbloqueo.
 - Uso de herramientas de debugging en aplicaciones paralelas: debugging de código, de memoria y multithread.
 - Ejemplos prácticos.
2. Análisis de rendimiento de aplicaciones paralelas:
 - Análisis de rendimiento: motivaciones y concepto.
 - Técnicas de instrumentación.
 - Técnicas de medida y análisis de rendimiento.
 - Herramientas para análisis de rendimiento de aplicaciones paralelas.
 - Ejemplos prácticos