

Centro de Matemática da Universidade do Porto

Mini-curso

Tópicos em cálculo de alto desempenho: cálculo de valores próprios e ferramentas para o desenvolvimento de aplicações científicas

Osni Marques (Lawrence Berkeley National Laboratory)

Sessão 1: Segunda-feira, dia 5 de Julho, 10h30 - 12h00, Sala 0.06

Algoritmos para o cálculo de autovalores

Sessão 2: Segunda-feira, dia 5 de Julho, 14h30 - 16h00, Sala 0.06

Algoritmos para o cálculo de autovalores (continuação)

Sessão 3: Terça-feira, dia 6 de Julho, 10h30 - 12h00, Sala 0.06

Ferramentas para o desenvolvimento de aplicações científicas

Local: Edifício dos Departamentos de Matemática
Rua do Campo Alegre, 687
4169-007 Porto

Contacto: Paulo Vasconcelos

Resumo:

Sessão 1 e 2: Algoritmos para o cálculo de autovalores

Desde longa data, o cálculo de autovalores e autovetores tem sido uma etapa importante na solução de vários problemas. Eis alguns exemplos: em química pares de autovalores e

autovetores estão relacionados com configurações básicas de moléculas (movimentos de "hinge-bending"), em centrais nucleares com fluxos de neutrões (o comportamento e super-critico quando o autovalor dominante e maior do que 1), em engenharia de estruturas com as propriedades dinâmicas do modelo examinado (frequências naturais e modos de vibração). Dependendo da complexidade dos problemas, do nível de detalhe adoptado para a discretização e solução de problemas contínuos, e também da precisão desejada para os resultados, a dimensão das matrizes envolvidas podem alcançar dimensões da ordem de 10^6 ou mesmo 10^9 . Embora em análises praticas apenas um subconjunto dos autovalores e autovetores seja suficiente, o calculo dos mesmos e certamente uma tarefa que requer um tempo de processamento elevado. O objectivo desta palestra e apresentar uma (breve) descrição de técnicas actualmente empregadas para calculo de autovalores e autovetores, bem como alguns problemas que tem inspirado o aprimoramento de técnicas existentes. Serão abordados algoritmos para matrizes densas e esparsas e também aplicações daqueles, entre as quais o uso de autovalores e autovetores em problemas de modelagem da estrutura interna da Terra, na busca de informações em colecções de documentos, e no estudo de novos materiais.

Sessão 3: Ferramentas para o desenvolvimento de aplicações científicas

Apesar de vários casos de sucesso, o desenvolvimento de aplicações científicas em computadores de arquitectura paralela continua a ser uma disciplina fragmentada e descoordenada. Com poucas excepções, entre as quais MPI ("Message Passing Interface") existe pouca padronização e pouca reutilização de programas. Como resultado, o desenvolvimento de programas em computadores de arquitectura paralela ainda é uma etapa onerosa e uma larga parte dos recursos é destinada ao desenvolvimento de programas ao invés do uso dos programas. Existem várias razões para esse situação, entre elas a complexidade inerente ao desenvolvimento de programas para computadores de alto desempenho. Um considerável número de iniciativas tem tentado resolver esse problema, com graus de sucesso variados. O objectivo desta palestra é apresentar e discutir algumas dessas iniciativas, entre as quais os projecto "ACTS Collection" ("Advanced Computational

Testing and Simulation Collection") e o projecto CCA ("Common Component Architecture").