

SGIkerreko goi mailako teknikaria (Kalkuku Zientifikoa), 1. taldea.

ZERREDA GAIAK

A. Simulazio erduei eta programei buruzko orokortasunak konputazio zientifikoan eta teknikoan.

Errendimendu handiko konputazioaren (HPC) arloko diziplinetan erabilitako konputazio erduei eta programa motei buruzko oinarritzko nozioak: materialen zientziak, prozesu molekularrak, jariakinen dinamika, bioinformatika, diseinu aeroespaziala, etab.

1. gaia. Simulazio ereduak eta programak, konputazio zientifikoan eta teknikoan.

B. Oinarritzko algoritmoak eta analisi numerikoa.

Simulazio ereduak inplementatzeko gehien erabilitako algoritmoak eta zenbakizko metodoak ezagutzea.

2.gايا. Eragiketa aritmetikoen inplementazioari eta errorearen kontrolari buruzko oinarritzko nozioak.

3.gايا. Aljebra linealeko algoritmoak.

4.gايا. Ekuazio diferentzialak.

5.gايا. Fourier-en transformatu azkarra.

C. Programazio paradigmatikak eta lengoaiak.

Programazio paradigmen oinarritzko nozioak (imperatiboa, funtzionala, objektuetara bideratutakoa, etab.), barne hartuta paraleloko programazioa (memoria partekatua, memoria banatua, etab.) eta programazio lengoaiak motak. Programazio imperatiboaren oinarritzko kontzeptuak (C/C++, Fortran: begiztak, baldintzapekoak, azpirrutinak, etab.).

6.gايا. Programazio eredu imperatiboaren, funtzionalen eta objektuetara bideratutakoaren oinarritzko ezaugarriak.

7.gايا. Programazio imperatiboa, Fortran edo C bezalako lengoaietan.

8.gايا. Gehien erabilitako datuen egiturei buruzko nozioak.

9.gايا. Paraleloko programazio paradigmatikoei buruzko nozioak: MPI eta OpenMP

D. HPCrako ordenagailuen arkitektura: kostuak eta kalkulu efizientzia.

Hardware soluzioak ezagutzea HPC ingurune, prozesadore arkitektura, saretarako, etab., baita haren eragina ere errendimendu konputazionalan.

10.gايا. HPC sistema moderno baten arkitektura: koreak, prozesagailuak, interkonexioak.

11.gايا. Memoria hierarkiak: erregistroak, cacheak, memoria bankuak.

12.gايا. Errendimendu konputazionala neurtzeko oinarritzko tresnak: profiling

13.gai. Paraleloko programen errendimenduari buruzko kontzeptuak: eskalagarritasuna, karga oreka.

E. Linux Sistemen Administrazioa

Linux-a erabiltzaile eta administrazio mailan, erabiltzaileen eta baliabideen kudeaketa eta oinarrizko segurtasun printzipioak barne hartuta.

14.gai. kernel eta sistemaren oinarrizko beste programa batzuen funtzioak.

15.gai. shell en eta erabiltzaileen oinarrizko kontzeptuak (sed, grep, awk...) Linux-en.

16.gai. Erabiltzaileen eta taldeen administrazioa.

17.gai. Diskoaren espazioaren kudeaketa, lokala eta sarean.

18.gai. Informatika sistemen segurtasunari buruzko oinarrizko nozioak.

F. HPC kalkulu zientifikoko sistemen administrazio espezifikoa.

HPC baliabideen kudeaketa eta monitorizatorako tresnak ezagutzea. Ilaren sistemak, monitorizazioa, irudien kudeaketa, etab.

Kodeen kudeaketa: konpilazio tresnak, matematika liburutegiak, komunikazio liburutegiak, etab.

19.gai. Baliabide konputazionalak esleitzea ilaren sistemen bidez.

20.gai. programazio inguruneen kudeaketa: konpiladoreak eta matematika liburutegiak.

21.gai. Paraleloko programazio inguruneen kudeaketa: komunikazio liburutegiak.

22.gai. Programazio ingurune eta programen bertsio ugari batera edukitzeko metodoak: environmental modules sistema.

G. Datuen bistaratzea eta analisisa

Programazio inguruneen eta tresna grafikoen ezagutzak hainbat simulazio motatan lortutako emaitzak aztertzeke.

23.gai. Bistaratzeko moduak HPCn: simulazioa egin bitartean eta ondoren; erabilitako hardware motak.

24.gai. HPCn erabilitako datuen formatu egituratuak: hdf5, netCDF.

25.gai. Datuak bistaratzeko programak eta utilitateak: NCAR, vmd, xmgrace.

26.gai. Datuak analizatzeko programazio inguruneak: R, python.

H. HPC UPV/EHU eta beste erakunde batzuetan.

Azpiegitura lokalak ezagutzea eta beste erakunde batzuetan daudenei buruzko nozioak, kudeaketa jarduera egokienak barne.

27.gai. UPV/EHUren konputazio zerbitzua.

28.gai. Super-konputazioko Espainiako Sarea (RES).

29.gai. Europako super-konputagailuen PRACE sarea.

30.gai. DOE eta NSFren super-ordenagailuak AEBn.

31.gaia. RES, PRACeren super-ordenagailuen sarrera eta baliabideen kudeaketari buruzko nozioak.

I. Bertsioak kontrolatzeko tresnak eta dokumentazioa.

32.gaia. Bertsioen kontrol sistema eta plataforma banatuak: git/GitHub, bzt, etab.

33.gaia. HPC ingurunetarako dokumentazio sistemak eta plataformak: webguneak, wikiak, read-the-docs, etab.

J. Beste batzuk

34. gaia Laneko arriskuen prebentzioa kudeatzeko sistemak unibertsitatean. Prebentzioa kudeaketan txertatzea. Erantzukizunak banatzea. Langileen parte hartzea lan arriskuen prebentzian. Ordezkaritzako eta partaidetzako organoak.

35.gaia. 4/2005 Legea, Otsailaren 18koa, Gizonen eta Emakumeen Berdintasunerakoa: arauaren xedea. Printzipio orokorrak. Administrazio araudian eta jardueran berdintasuna sustatzeko neurriak.

IRADITAKO BIBLIOGRAFIA

* High Performance Computing, K. Dowd, C. Severance, O Reilly. Bertsio librea: <http://cnx.org/content/col11136/1.5/>

* Introduction to High Performance Scientific Computing, Victor Eijkhout (disponible online en <http://pages.tacc.utexas.edu/~eijkhout/istc/istc.html>)

* Linux Command Line, A Complete Introduction, William E. Shotts, Jr.

* UNIX and Linux System Administration Handbook (4th Edition), Evi Nemet et al.

* Linux Shell Scripting Cookbook, Sarath Lakshman

* Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing.
(Guía y enlaces en https://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_Recipes)

* Wikipedia erabil daiteke HPC metodoak erabiltzen dituzten diziplinen abiapuntu erabilgarriak aurkitzeko. Hona hemen erreferentzia zehatz batzuk:
- Computational Physics. J.M. Thijssen. Cambridge University press.
- Handbook of Computational Quantum Chemistry. David B. Cook. Oxford Science Publications.

* Ikerketari Aplikatutako Informatika Zerbitzuaren memoriak (Kalkulu Zientifikoa) (<http://www.ehu.es/sgi/publicaciones/informes>)

* Beste konputazio zentro batzuk, adibide gisa: Barcelona Supercomputer Center (www.bsc.es), National Energy Research Supercomputer Center (www.nersc.gov), Texas Advanced Computer Center (tacc.utexas.edu).

Beste batzuk: PRACE: <http://www.prace-project.eu/> , Top-500 : www.top500.org
<https://hpc.llnl.gov/software/visualization-software>

POSTUAN BETE BEHARREKO ZEREGINAK

- Azpiegitura zientifikoaren antolakuntza.
- Zerbitzuko azpiegitura zientifikoaren erabilera politikak planifikatzea eta kudeatzea.
- Baliabide zientifikoak areagotzeko politiken planifikazioa, baliabide horiek lehiakorak izaten jarrai dezaten.
- Software kudeaketa: beharrak ebaluatzea eta, hala behar denean, erostea.
- Hardware kudeaketa: bermeak berrikustea eta mantentzeak kontratatzeke beharrak ebaluatzea.
- Baliabide gehiago izateko proiektuak diseinatzea (hornitzaileekin biltzea, erosi beharreko baliabide konputazionalak hautatzea, baldintzen agiri teknikoa egitea) eta exekutatzea (lehiaketaren balorazioa eta erabakia).
- Fakturazioa.
- Ikertzaileei jarraipena egitea eta haien lehentasunak aztertzea, ingurune egoki bat bermatzeko.
- Tresnak ikertzaileentzako pertsonalizatzea.
- LHen tutoretza.
- Langile berrien prestakuntza.
- Ikertzaileen prestakuntza.
- Ikastaroak eta workshopak antolatzea.
- Kalkulu azpiegituraren erabiltzaileentzako euskarri teknikoa eta zientifikoa.
- Informatika sistemen kudeaketa teknikoa, hardwarea eta softwarea.
- Beste konputazio zentro batzuetan ongi funtzionatzen duten ideiak identifikatzea eta inplementatzea.