



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATEMÁTICAS
APLICADAS Y EN SISTEMAS

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERIA
DE LA COMPUTACIÓN

(TITULO DE LA TESINA)

T E S I N A

PARA OBTENER EL GRADO DE:

**ESPECIALISTA EN CÓMPUTO DE
ALTO RENDIMIENTO**

PRESENTA

JOSÉ ANTONIO AYALA BARBOSA

DIRECTOR DE TESINA

DR. JOSÉ JESÚS CARLOS QUINTANAR SIERRA

Agradecimientos

El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi.

Índice

Agradecimientos	3
Índice	5
Introducción	7
Capítulo 1. Marco Teórico	8
1.1 Química	8
1.1.1 Físicoquímica	8
1.2 Física	8
1.2.1 Mecánica Clásica	8
1.2.2 Mecánica Cuántica	9
1.2.3 Constante de Planck	9
1.2.4 Principio de incertidumbre	9
1.3 Ecuación de Schrödinger	10
1.4 Teoría del Funcional Densidad (DFT)	11
1.4.1 Ecuación de Kohn-Sham	12
Computación	12
2.1 Generealdades	12
2.1.1 Proceso	12
2.1.2 Estado	13
2.1.3 Memoria	13
2.1.4 Ejecución	13
2.1.4 Programa	13
2.2 CPU	13
2.3 GPU	14
2.3.1 Tipos de GPU	15
2.4 Memoria	16
2.4.1 Tipos de almacenamiento	16
2.4.2 Arreglos de memoria	16
Capitulo 2. Cómputo de Alto Rendimiento	18
2.1 High Performance Computing	18
2.2 Surgimiento del Multicore	18
2.3 Ejecución de instrucciones	18
2.4 Taxonomía de Flynn	19
2.4.1 SISD: Single Instruction, Single Data	19
2.4.2 SIMD: Single Instruction, Multiple Data	19

2.4.3 MISD: Multiple Instruction, Single Data	20
2.4.4 MIMD: Multiple Instruction, Multiple Data.....	20
2.5 Diferencia entre procesos.....	21
2.5.1 Procesador físico	21
2.5.2 Socket	21
2.5.3 Core o Núcleo	21
2.5.4 Procesador virtual:	21
2.5.5 Thread	21
2.6 Topología de Procesos	21
2.7 Principales limitaciones del paralelismo	22
Capítulo 3. Algoritmo de Jacobi.....	23
3.2.1 Forma cuadrática.....	23
3.2.2 Eigensistemas	23
3.2.3 Transformación de coordenadas.....	24
3.2.4 Eigenvalores	25
3.2.5 Eigenvector	26
Capítulo 4. Implementación	27
Capítulo 5. Pruebas y resultados	28
Conclusiones	29
Tabla de ilustraciones.....	30
Bibliografía	31
Anexos.....	33

Introducción

La Teoría del Funcional Densidad (DFT) simplifica los cálculos, dejando a un lado el uso de la función de onda en la determinación del movimiento de electrones y átomos de una molécula. En su lugar, la DFT calcula las propiedades electrónicas a partir de la densidad tridimensional de las nubes electrónicas del sistema. Esta simplificación ha ayudado a poner los cálculos cuánticos en manos de un gran número de investigadores, no sólo de teóricos puros y duros. La DFT simplifica los cálculos, dejando a un lado el uso de la función de onda en la determinación del movimiento de electrones y átomos de una molécula. En su lugar, la DFT calcula las propiedades electrónicas a partir de la densidad tridimensional de las nubes electrónicas del sistema. Esta simplificación ha ayudado a poner los cálculos cuánticos en manos de un gran número de investigadores, no sólo de teóricos puros y duros.

La unidad de procesamiento de gráficos (GPU) es uno de los componentes más importantes en los ordenadores modernos. Es aquí donde se construyen los increíbles gráficos que podemos ver en los videojuegos modernos.

Como ya se observó, en la mecánica cuántica se requiere de un gran poder de cómputo. Varias de esas aplicaciones están relacionadas con la solución de las ecuaciones de Kohn-Sham, dentro de la teoría de funcionales de la densidad, también se han creado diversas aplicaciones relacionadas con métodos basados en la función de onda que estiman la correlación electrónica o energías de ionización. La potencia de las GPUs se ha hecho presente con sistemas computacionales relacionadas con el modelado de átomos en moléculas.

Capítulo 1. Marco Teórico

1.1 Química

La química es la ciencia que estudia la estructura, composición y las propiedades de la materia, así como también las transformaciones que se experimentan al realizarse reacciones en ella.

La química teórica es una rama de la química que aplica herramientas teóricas y muchas veces computacionales para resolver los problemas que la química tradicional no puede responder experimentalmente, debido a la gran inestabilidad que pueda existir.

1.1.1 Fisicoquímica

La química como una ciencia física, es única al examinar y crear estructuras moleculares, ya que controla los sistemas moleculares a través del diseño y desarrollo de herramientas de estudio del comportamiento, tanto de los átomos, como de las moléculas, o a mayor escala como sistemas moleculares tan complejos como se requieran.

Las investigaciones en fisicoquímica se realizan por medio del enfoque de la energía de las estructuras químicas y su transformación, también provee las bases moleculares para la investigación todas las tecnologías de que permiten la conversión de energía.

Al haber avances en la ciencia tomando en cuenta este enfoque, se requieren realizar modelos que permitan realizar simulaciones atomísticas¹ del comportamiento molecular, aunque dichas simulaciones pueden ser desde la interacción entre átomos, no se descarta que se requiera representar dinámica molecular en seres vivos. Por dicho motivo, es necesario abordar la problemática con ayuda de tecnologías computacionales para, así, obtener resultados mucho más rápida y fácilmente, teniendo como consecuencias adjunta el poder formular nuevas direcciones en cuanto a las reacciones químicas, en menor tiempo.

1.2 Física

Es la ciencia que estudia las propiedades de los cuerpos y las leyes que rigen las transformaciones que afectan a su estado y a su movimiento, sin alterar su naturaleza.

1.2.1 Mecánica Clásica

En el campo de la física, la mecánica clásica es uno de las dos principales ramas de estudio en la ciencia de la mecánica.

¹ **Atomístico**, relativo a atomismo, donde el atomismo es la doctrina que explica la formación del mundo por la concurrencia fortuita de los átomos.

Tiene que ver con el conjunto de leyes físicas que rigen y la matemática que describe los movimientos de un cuerpos y las distribuciones geométricas dentro de un límite determinado por la acción de un sistema de fuerzas.

1.2.2 Mecánica Cuántica

La otra rama es la mecánica cuántica, también conocida como la física cuántica o la teoría cuántica, es la disciplina que estudia y brinda una descripción del movimiento de partículas a escalas espaciales muy pequeñas.

Delimita matemáticamente una gran parte del área, ya que trabaja con el comportamiento dual de partícula y de onda, similar a como son las interacciones de la energía y la materia.

Dentro de la mecánica cuántica, existe la mecánica cuántica relativista, y es la generalización que ayuda a comprender el comportamiento de las partículas que alcanzan velocidades cercanas a la luz, donde la ecuación de Schrödinger deja de ser efectiva.

1.2.3 Constante de Planck

La constante de Planck es una de las constantes fundamentales de la física, que fue propuesta para explicar la radiación de un cuerpo negro. Si se acepta la suposición de que la materia sólo puede tener estados de energía discretos y no continuos, entonces la energía irradiada no puede tomar cualquier tipo de valores sino únicamente valores múltiples enteros de un quantum² de energía. La constante de Planck vincula el valor de la energía a la frecuencia de la radiación:

$$E = hf$$

$E = \text{energía de la frecuencia}$
 $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ [Js]} \text{ (cte de Planck)}$
 $f = \text{frecuencia de onda}$

1.2.4 Principio de incertidumbre

Principio de incertidumbre o también llamada la relación de indeterminación de Heisenberg, establece que es imposible medir simultáneamente, y con precisión absoluta, el valor de la posición y la cantidad de movimiento de una partícula. Por ello define una de las diferencias fundamentales entre física clásica y física cuántica al no tener un símil en el campo de lo clásico.

La posición y la cantidad de movimiento de una partícula, respecto de uno de los ejes de coordenadas, son magnitudes complementarias que solo se pueden medir probabilísticamente con un límite fijado en la constante de Planck.

² Un quantum o cuanto es la menor cantidad de energía que puede transmitirse en cualquier longitud de onda.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$

$\Delta x =$ indeterminación de la posición

$\Delta p_x =$ indeterminación de la cantidad de movimiento

1.2.5 Aproximación de Born-Oppenheimer

Una de las aproximaciones fundamentales de la mecánica cuántica es el desacoplamiento de los movimientos electrónicos y nucleares. Al ser la masa del núcleo mayor a la de los electrones, su velocidad es menor, por lo que para él los electrones funcionan como una nube de carga, y por otro lado para los electrones, los núcleos parecen estar estáticos.

1.3 Ecuación de Schrödinger

A diferencia de la mecánica clásica que determina los elementos por su posición y velocidad, la mecánica cuántica calcula la probabilidad de encontrar partículas en una cierta posición física gracias a la ecuación de Schrödinger. Pero para poder ser implementada se requiere de mucho poder de cómputo, y al ser calculada con métodos numéricos, depende de cuál se elija, los resultados que se arrojan pueden ser algo imprecisos.

La ecuación de Schrödinger considera varios aspectos para poder ser implementada, dentro de los fundamentales están:

- La existencia de un núcleo atómico, en donde se concentra la mayoría del volumen del átomo.
- Los niveles energéticos donde se distribuyen los electrones según su energía.
- La dualidad onda-partícula.
- La probabilidad de encontrar al electrón.

Aunque con la mecánica cuántica queda claro que no se puede saber dónde se encuentra un electrón, sí define la región en la que puede encontrarse en un momento dado. Cada solución de la ecuación de ondas de Schrödinger, Ψ , describe un posible estado del electrón. El cuadrado de la función de onda, Ψ^2 , define la distribución de densidad electrónica alrededor del núcleo. Este concepto de densidad electrónica da la probabilidad de encontrar un electrón en una cierta región del átomo, llamada orbital atómico, concepto análogo al de órbita en el modelo de Bohr.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

$\Psi =$ función de onda

$m =$ masa del electrón

$h =$ constante de Planck

$E =$ energía total del electrón

$V =$ energía potencial del electrón

1.4 Teoría del Funcional Densidad (DFT)

Es un procedimiento alternativo a la ecuación de Schrödinger que permite una descripción muy exacta de los sistemas con muchas partículas, la DFT simplifica los cálculos, dejando a un lado el uso de la función de onda en la determinación del movimiento de electrones y átomos de una molécula.

Con esta teoría potencial efectivo esta determinado por la densidad electrónica del sistema, se calculan las propiedades electrónicas a partir de la densidad tridimensional de las nubes electrónicas. (Urriolabeitia 2017)

La aproximación DFT se basa en la estrategia de introducir la correlación electrónica usando funcionales³ de la densidad electrónica. Estos métodos usan los teoremas de Hohenberg-Kohn, en el que se demuestra la existencia de un solo funcional que determina la energía del estado fundamental y la densidad electrónica exactamente.

- *Primer teorema de Hohenberg-Kohn.*

Existe una correspondencia de uno a uno entre el estado base de la densidad de un sistema de muchos electrones y el potencial externo que se genera al suponer la aproximación de Born-Oppenheimer. Una consecuencia inmediata es que el valor esperado del estado base de cualquier observable⁴ \hat{O} es único funcional de la densidad electrónica exacta del estado base:

$$\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle \geq O[\rho]$$

- *Segundo teorema de Hohenberg-Kohn.*

El funcional de Hohenberg-Kohn es universal para todo sistema de muchos electrones y alcanza su valor mínimo, igual a la energía total del estado base, para la densidad del estado base correspondiente a la energía del potencial.

La universalidad del funcional implica que al ser un sistema de muchas partículas, no depende de ninguna variable nuclear, es decir que contiene información únicamente de los electrones del sistema. Por ello se puede definir el operador densidad como:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r})$$

\vec{r} = punto dónde probablemente se encuentre un electrón

³ Funciones de funciones

⁴ Propiedad del estado de un sistema que puede ser determinada ("observada") por alguna secuencia de operaciones físicas

1.4.1 Ecuación de Kohn-Sham

Sin embargo, el teorema no da la forma del funcional. Las aportaciones de la ecuación de Kohn-Sham a la DFT que emplea a la densidad electrónica como variable básica en lugar de la función de onda electrónica. La energía electrónica se divide en varios términos:

$$\begin{aligned} E &= E^T + E^V + E^J + E^{XC} \\ E^T &= \text{energía cinética electrónica} \\ E^V &= \text{energía de atracción núcleo - electrón} \\ E^J &= \text{energía de repulsión electrón - electrón} \\ E^{XC} &= \text{energía potencial de correlación e intercambio} \end{aligned}$$

Más propiamente podemos expresar de la siguiente manera:

$$\overline{H_{KS}} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{e^2}{4\pi} \int \frac{\rho(\vec{r})}{|\vec{r}_i - \vec{r}|} d\vec{r} + E^J + E^{XC}$$

La ventaja de que la densidad es una magnitud mucho más simple que la función de onda, simplificando las ecuaciones y bajando el costo computacional. Por ello hasta el momento es el procedimiento preferido para abordar problemas a partir de una cierta complejidad.

A partir de la ecuación de Kohn-Sham se puede hallar la densidad exacta del estado base tomando en cuenta dos teoremas.

1.4.1.1 Teorema de Kohn-Sham

La densidad exacta del estado base $\rho(\vec{r})$ de un sistema de N electrones es

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \Psi^*(\vec{r}_i) - \Psi(\vec{r})$$

donde las funciones de onda electrónicas son las N soluciones de menor energía de la ecuación de Kohn-Sham, simplificando podemos obtener:

$$\overline{H_{KS}}\Psi_i = \epsilon_i\Psi_i$$

Computacion

2.1 Generalidades

Para entrar en contexto, es necesario mencionar algunos conceptos generales sobre cuales son las bases de la computación

2.1.1 Proceso

Cambio de estado de la memoria por acción del procesador.

2.1.2 Estado

Valor instantáneo de una variable.

2.1.3 Memoria

Dispositivo que almacena datos.

2.1.4 Ejecución

Generación de señales digitales que realizan una instrucción.

2.1.4 Programa

Especificación de uno o varios procesos.

2.2 CPU

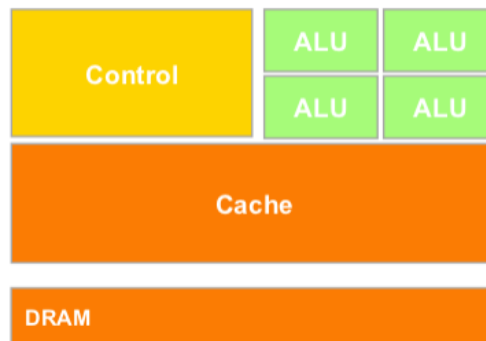
CPU son las siglas en ingles de Central Processing Unit (Unidad de Proceso Central). Es el componente que procesa todas las instrucciones y datos del software y el hardware motivo por el cual constituye el elemento mas importante de la computadora.

El funcionamiento de la CPU se basa en cuatro sencillos pasos: lectura, decodificación, ejecución y escritura. Está conformada principalmente por los siguientes componentes

- Unidad aritmético-lógica (ALU): realiza, como su nombre lo indica, operaciones aritméticas y lógicas. Es el motor de cálculo que recibe un código y escoge la operación requerida para decodificarlo.
- Unidad de control: recibe los datos de entrada e instrucciones desde la memoria, ejecuta y envía la información una vez procesada.
- Caché: almacena datos temporalmente.
- Bus de direcciones: encargada de enviar las direcciones a la memoria y los periféricos para dar a conocer dónde se debe escribir o leer un dato.
- Bus de datos: permite que el procesador envíe o reciba datos de la memoria y periféricos.
- Registro de instrucción: almacena la instrucción que se está llevando a cabo en cada momento.
- Contador de programa: contiene la dirección de memoria que será la próxima instrucción que deberá ejecutarse.
- Registro de direcciones de memoria: almacena la siguiente dirección de memoria en que se va a leer o escribir un dato.

El CPU es un procesador de propósito general, lo que significa que puede hacer cualquier tipo de calculo, pero esta diseñada para realizar el cómputo en serie, o sea paso a paso. Aunque se pueden utilizar bibliotecas para realizar programación concurrente ya que el hardware *per se* no tiene esa implementación. Por otro lado, se requiere que una computadora tenga al menos dos CPU para realizar tareas paralelas.

La arquitectura, en términos generales, se puede representar como:

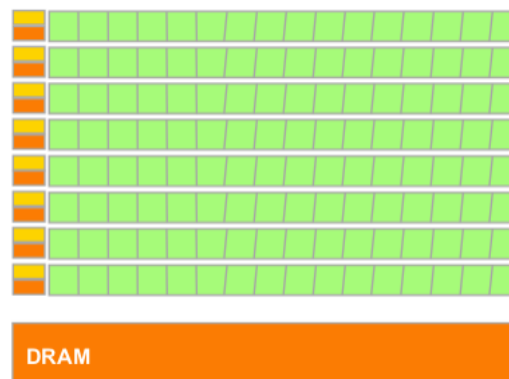


2.3 GPU

La GPU o Graphic Processing Unit (Unidad de Proceso Central), es un coprocesador, este componente es muy parecido al CPU, solo que el tipo de procesamiento al que se dedica es al de gráficos. De modo que la carga de este tipo de operaciones puede redirigirse del CPU al GPU para así aligerar la carga de información y poder dedicarse a realizar otras tareas.

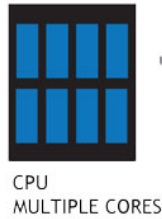
La diferencia entre ambos procesadores radica en la arquitectura de cada uno. Aunque están diseñados para funcionar de modo muy similar, las GPU están construidas, gráfica en términos de arquitectura del Hardware, de modo que sean mucho más eficiente para el cálculo de información.

La arquitectura, en términos generales, se puede representar como:



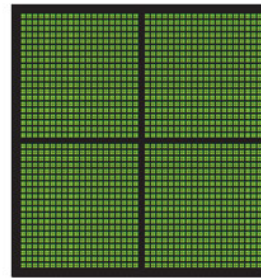
El CPU para operaciones secuenciales en cambio, Las GPU son diseñadas como computadoras especializadas para el cómputo numérico.

La diferencia mayor entre la CPU está en su filosofía de diseño:



Multicores: Mejorar el desempeño de soluciones secuenciales.

Manycore: Optimizar el throughput⁵ de muchos threads ejecutados en paralelo.



GPU
THOUSANDS OF CORES

2.3.1 Tipos de GPU

Actualmente existen tres grandes tipos de unidades de procesamiento gráfico. Más que por la arquitectura, estos difieren entre si por el modo en que son implementadas en términos de Hardware:

2.3.1.1 Tarjetas dedicada

Este tipo de unidades gráficas son las que proporcionan mayor potencia. Como su nombre lo indica, tienen una serie de especificaciones y están expresamente diseñadas para cumplir con sus tareas específicas. Generalmente se suele entender que una tarjeta dedicada es aquella que se integra a la tarjeta madre mediante un puerto aparte y lo más importante, posee una memoria RAM independiente que solo podrá ser utilizada por el GPU.

2.3.1.2 GPU integrados

A diferencia de las unidades dedicadas, las integradas utilizan la memoria del sistema para realizar sus funciones. Este tipo de integrados son los más comunes en las computadoras modernas. El núcleo central de estas unidades puede estar en la tarjeta madre, pero recientemente las cosas han cambiado, y tanto los fabricantes como AMD o Intel suelen

⁵ Tasa de transferencia efectiva, es el volumen de trabajo o de información neto que fluye a través de un sistema.

integrarlas dentro sus procesadores, dichas tecnologías han sido denominadas como AMD Accelerated Processing Unit e Intel HD Graphics respectivamente.

2.3.1.3 Tarjetas híbridas

Diseñadas para mantener precios contenidos y al mismo tiempo aseguran niveles de potencia adecuados. En esta clasificación de unidades gráficas híbridas también comparten la memoria del sistema, pero para disminuir el tiempo de latencia de esta última, integran una cantidad limitada de memoria propia que se encarga de realizar las labores inmediatas.

2.4 Memoria

La memoria es el dispositivo que almacena los datos por un periodo de tiempo. La velocidad y rendimiento de su sistema dependen de la cantidad de memoria que esté instalada en su computadora.

2.4.1 Tipos de almacenamiento

2.4.1.1 Almacenamiento primario

El almacenamiento primario es el que está directamente conectada a la CPU de la computadora y debe estar presente para que este procesador efectúe cualquier función.

Las computadoras actuales utilizan la Random Access Memory (RAM), o Memoria de Acceso Aleatorio, esta memoria primaria contiene los programas en ejecución y los datos con que operan, tiene la ventaja de que es muy rápida, pero por ello es costosa y es limitada.

2.4.1.2 Almacenamiento secundario

Este tipo de memoria requiere que la computadora use sus canales de entrada/salida para acceder a la información y se utiliza para almacenamiento a largo plazo de información persistente.

En las computadoras actuales se suele usar el disco duro para almacenar los datos, es mucho mas grande, pero lento de acceso. Por este motivo, la memoria secundaria se ha ganado el acrónimo de almacenamiento masivo.

2.4.2 Arreglos de memoria

Existen dos grandes clasificaciones de la memoria, y esto corresponde a la manera en que serán accedidas las direcciones de memoria.

2.4.2.1 Memoria compartida

Las diferentes unidades de computo, por ejemplo el CPU o la GPU, comparten una memoria común a la cual todos tienen acceso en igualdad de condiciones.

2.4.2.2 Memoria distribuida

En esta denominación, las diferentes unidades de cálculo, tienen una memoria propia a la cual los demás procesadores no tienen acceso directo y deben tener implementados algunos protocolos para compartir la información.

Capítulo 2. Cómputo de Alto Rendimiento

2.1 High Performance Computing

El cómputo de alto rendimiento o cómputo de alto desempeño, según la traducción, son todas aquellas técnicas computacionales que solucionan problemas complejos, comúnmente científicos, de una manera más acelerada que usando sistemas probablemente más simples.

2.2 Surgimiento del Multicore

Debido a que el calor generado por el CPU es proporcional a la frecuencia de reloj, entre más se aumenta la velocidad del reloj, el calor aumenta y hace necesario preocuparse por implementar mejores sistemas de ventilación, lo que trae consigo el incremento del consumo energético, el aumento de tamaño de los equipos y lo que más impacto tiene aún, el aumento de costos.

Por ello surge la necesidad de buscar técnicas para que con la misma frecuencia pueda tener mas potencia de computo. En este punto surge la integración de varios procesadores en una misma tarjeta o también llamado el multicore. Esto nos ayuda a bajar la frecuencia de cada procesador pero procesar más información en paralelo. Ayudando así a bajar el gasto energético.

Aunque el multicore, en principio surgió para la disipación, ahora aprovecha la existencia de muchos núcleos de procesamiento para realizar diferentes tareas al mismo tiempo y ayudar a resolver algunos problemas en menor tiempo.

2.3 Ejecución de instrucciones

Ahora que se conoce la manera en que esta diseñada la arquitectura de ambos procesadores, tanto CPU como GPU, podemos hablar sobre la manera en que ocurre la ejecución de las tareas de un programa, dándonos la ejecución serial y la paralela, donde la primera hace referencia a que las instrucciones de un programa son ejecutadas de manera secuencial (una a la vez); la segunda, como su nombre lo da a entender, varias tareas de un mismo programa son ejecutadas de forma simultanea.

Para realizar un procesamiento en paralelo es necesario identificar los tipos de memoria y así conocer en donde se encuentran las variables a ocupar. Podemos identificar dos grandes tipos, la memoria compartida, donde todos los procesos pueden acceder a todas las direcciones de una memoria común, y en la memoria distribuida cada procesador accede a su memoria local comunicándose con otros mediante dispositivos de entrada/salida.

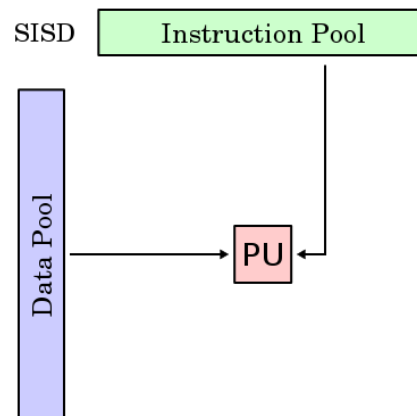
2.4 Taxonomía de Flynn

La taxonomía de Flynn es la clasificación mas extendida sobre el paralelismo, en donde se distinguen el numero de datos e instrucciones que puede procesar a la vez, dichos datos pueden ser simples (solamente uno) o múltiples a la vez.

		Datos	
		Simple	Múltiples
Instrucciones	Simple	SISD	SIMD
	Múltiples	MISD	MIMD

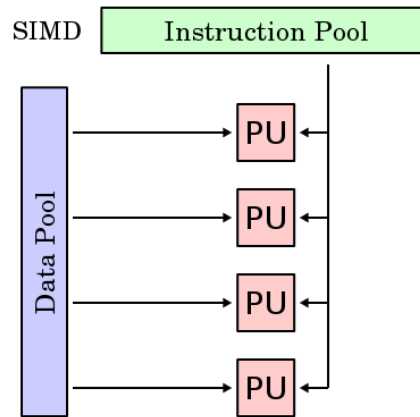
2.4.1 SISD: Single Instruction, Single Data

En esta primer categoría el procesador realiza únicamente una instrucción por cada ciclo de reloj, y y dicha tarea solamente trabaja con un dato a la vez. Este es el modelo más antiguo de una computadora y el más extendido.



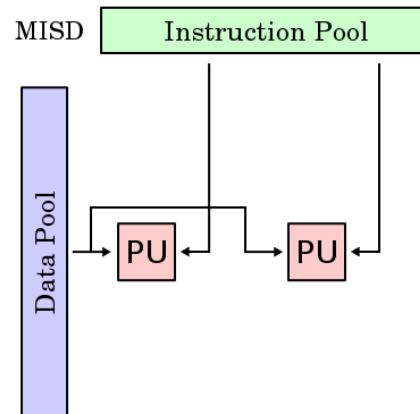
2.4.2 SIMD: Single Instruction, Multiple Data

Es necesario tener varios procesadores, aquí todos ellos ejecutan la misma instrucción, pero cada uno procesa un dato diferente, cabe destacar que todas las unidades procesan simultáneamente.



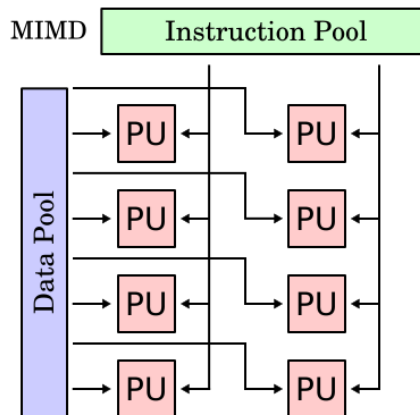
2.4.3 MISD: Multiple Instruction, Single Data

Cada unidad de procesamiento ejecuta una instrucción distinta pero aplicándolas al mismo dato. Este categoría tiene una aplicación muy limitada en la vida real.



2.4.4 MIMD: Multiple Instruction, Multiple Data

Cada unidad ejecuta una instrucción distinta, y admite que los procesadores operen diversos datos, lo cual ayuda a acortar tiempo al realizar diversas tareas con diferentes datos simultáneamente.



2.5 Diferencia entre procesos

Al momento de hablar sobre programación paralela, es necesario entender la forma en que están arreglados los procesadores y así comprender de que tipo de interacción tienen.

2.5.1 Procesador físico

Aquí se tiene un único chip de considerable tamaño que realiza las operaciones con las señales digitales en una computadora.

2.5.2 Socket

Referida a la placa base donde se conecta el procesador, por usos y costumbres se le conoce así también al conjunto de procesadores físicos dentro de un chip.

2.5.3 Core o Núcleo

Son, individualmente, los procesadores físicos que contiene un Socket.

2.5.4 Procesador virtual:

Con ayuda del software se puede hacer que un core funcione como dos o más concurrentemente, haciendo creer que existen varios.

2.5.5 Thread

También llamado con los nombres de hilo, hebra, fibra, lienzo, proceso ligero. Es un subproceso que se genera al partir una tarea en varios pedazos, y cada uno de esos pedazos realizara una parte del total de la tarea de manera simultanea.

Cada hilo tiene:

- Contador de programa.
- Pila de ejecución.
- El estado del procesador (incluyendo el valor de los registros).

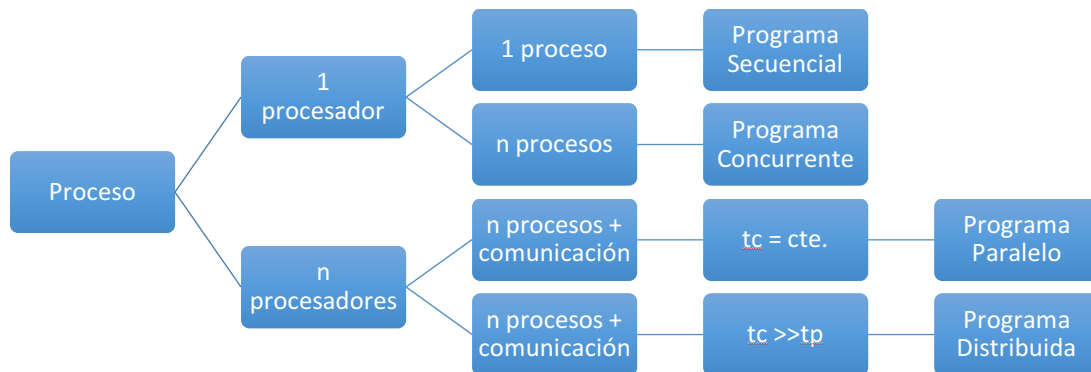
Los hilos de ejecución que comparten los mismos recursos, son en conjunto conocidos como un proceso.

Cuando un hilo modifica un dato en la memoria, los otros hilos pueden acceden a ese dato modificado inmediatamente.

2.6 Topología de Procesos

Podemos expresar los tipos de paralelismo con una clasificación de el numero de procesos que se realizan y la forma en que lo hacen. Si se tiene un solo procesador y se realiza un

proceso a la vez, tenemos un programa secuencial. Si se tiene un solo procesador, pero es posible realizar varios procesos a la vez, eso sí, dando un corto tiempo de procesamiento a cada uno, tenemos un programa concurrente. Por otra parte si se utilizan n procesadores para realizar n procesos, caemos en dos clasificaciones que tienen al tiempo de comunicación como diferenciadora. El primer caso es llamado como programación paralela, aquí el tiempo de comunicación es aproximadamente constante, mayormente ocurre cuando se utilizan los cores de un mismo socket. El segundo caso entra cuando el tiempo de comunicación no es constante y muchas veces es mayor al tiempo de procesamiento, ya que la mayoría de las veces se lleva a cabo por una red y esta sujeta a los protocolos y ancho de banda de la misma.



2.7 Principales limitaciones del paralelismo

Un problema muy recurrente que siempre está presente en la limitación de la aceleración de las resoluciones de problemas es la barrera de potencia y que es necesario recalcar que la frecuencia del reloj no puede ser incrementada sin exceder el sistema de enfriamiento o puede ser destruido el equipo por la gran cantidad de calor que se genera.

La siguiente limitante es a la que nos enfrentamos es la barrera de memoria, donde el acceso a los datos, ya sea la memoria o el bus de datos, es muy limitado por temas de materiales de conducción de la energía.

Por último, tenemos un problema que no puede ser solucionado de manera física, la barrera de instrucciones. Está limitante es más bien matemática ya que plantea que todas las estrategias paralelas a nivel instrucción están en uso, lo que quiere expresar que el Algoritmo que se está implementando ya no da para más, se ha llegado al tope de opciones paralelas.

Capítulo 3. Algoritmo de Jacobi

3.2.1 Forma cuadrática

Todo polinomio de segundo grado homogéneo de la forma:

$$q = X'AX = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}x_i x_j$$

$$q(x_1, x_2, \dots, x_n) = (a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots + 2a_{n-1n}x_{n-1}x_n)$$

Dicho polinomio puede expresarse de una manera matricial de la forma:

$$q(x_1, x_2, \dots, x_n) = (x_1, x_2, \dots, x_n) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = X'AX$$

Donde la matriz A asociada a la forma cuadrática es una matriz simétrica de orden n cuyos elementos de la diagonal principal son los coeficientes de los términos cuadráticos de la expresión polinómica, y los restantes elementos de la matriz son la mitad de los coeficientes de los términos no cuadráticos de dicha expresión. Esta relación entre los elementos de una y otra expresión de la forma cuadrática, permite obtener fácilmente cada una de ellas a partir de la otra.

Ejemplo.

Se tiene el siguiente polinomio y se expresará la matriz de forma cuadrática.

$$q = x_1^2 + 2x_2^2 - 7x_3^2 - 4x_1x_2 + 8x_1x_3$$

$$q = X' \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ -2 & 2 & 0 \\ 4 & 0 & 7 \end{bmatrix} X$$

3.2.2 Eigensistemas

En muchos problemas en matemáticas aplicadas, es necesario el resolver ecuaciones lineales con la forma

$$\begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$$

o de la forma

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}$$

donde A es una matriz de $n \times n$ con parámetros escalares λ conocidos como valores característicos o eigenvalores, x es una matriz columna de variables independientes también llamado *eigenvector*.

$$A \cdot x = \lambda x$$

Obviamente cualquier múltiplo de un eigenvector x podrá considerarse como eigenvector, excepto para este caso el 0.

El problema es encontrar λ y su correspondiente eigenvector.

3.2.3 Transformación de coordenadas

Para mostrar el siguiente concepto, tenemos una matriz x como vector columna con dos componentes x_1 y x_2 , si ponemos el los ejes de \bar{x}_1 y \bar{x}_2 con el mismo origen, tenemos que el vector \overline{OD} tiene las dos diferentes componentes mencionadas. Trigonométricamente tenemos:

$$\begin{aligned} x_1 &= \bar{x}_1 \cos \theta - \bar{x}_2 \sin \theta \\ x_2 &= \bar{x}_1 \sin \theta + \bar{x}_2 \cos \theta \end{aligned}$$

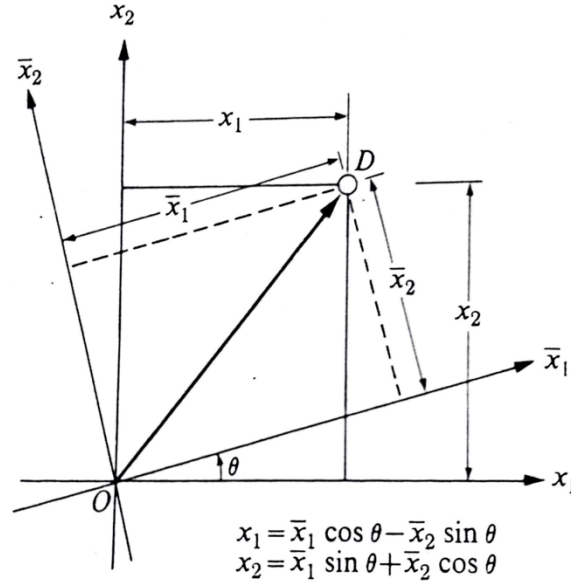
o en la forma matricial

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix}$$

A esto se le llama la relación de transformación, lo que da

$$x = T \bar{x}$$

que conecta los dos sistemas x y \bar{x} .



Lo importancia de la matriz T toma lugar cuando sustituimos la ecuación en la de los eigensistemas, dándonos

$$AT\bar{x} = \lambda T\bar{x}$$

pudiendo también

$$T'AT\bar{x} = \lambda T'T\bar{x}$$

recordando que $T'T = I$, comprobándolo con

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

por ende deducimos que

$$\begin{aligned} T'AT\bar{x} &= \lambda I\bar{x} \\ &= \lambda \bar{x} \end{aligned}$$

3.2.4 Eigenvalores

Nuestro objetivo es que todos los elementos fuera de la diagonal se vuelvan cero, para ello es necesario seleccionar un ángulo de rotación que permita realizarlo.

$$\begin{aligned} B &= \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_{11}\cos^2\theta + 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\sin^2\theta & a_{12}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + \sin\theta\cos\theta(a_{22} - a_{11}) \\ a_{12}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + \cos\theta\sin\theta(a_{22} - a_{11}) & a_{11}\sin^2\theta - 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\cos^2\theta \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Como queremos eliminar el elemento b_{12} fuera de la diagonal y teniendo en cuenta que b_{12} y b_{21} son similares

$$a_{12}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + \cos\theta\sin\theta(a_{22} - a_{11}) = 0$$

por identidades trigonométricas podemos concluir

$$\tan 2\theta = \frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}}$$

Dando como resultado esperado

$$B = \begin{bmatrix} a_{11}\cos^2\theta + 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\sin^2\theta & 0 \\ 0 & a_{11}\sin^2\theta - 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\sin^2\theta \end{bmatrix}$$

Con lo que al final del procedimiento podemos obtener que b_{11} y b_{22} son los eigenvalores deseados.

3.2.5 Eigenvector

Capítulo 4. Implementación

El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi.

Capítulo 5. Pruebas y resultados

El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi.

Conclusiones

El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi.

Tabla de ilustraciones

No se encuentran elementos de tabla de ilustraciones.

Esta es una tabla de contenidos automática. Para usarla, aplique los estilos de encabezado (en la ficha Inicio) al texto que va en la tabla de contenidos y después actualice la tabla.

Si quiere escribir sus propias entrada, use una tabla de contenidos manual (en el mismo menú que la automática).

Bibliografía

- <https://chemistry.stanford.edu/research/research-areas/physical-chemistry> (último acceso: 22 de junio de 2018).
- <https://chemistry.stanford.edu/research/research-areas/theoretical-chemistry> (último acceso: 22 de junio de 2018).
- http://www.ub.edu/web/ub/es/recerca_innovacio/recerca_a_la_UB/instituts/institutspropis/iqtcub.html (último acceso: 22 de junio de 2018).
- http://www.demon-software.com/public_html/index.html (último acceso: 23 de junio de 2018).
- http://www.demon-software.com/public_html/program.html#branches (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <https://www.ibm.com/thought-leadership/summit-supercomputer/> (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <https://www.amd.com/es-xl/products/graphics/server/gpu-compute> (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <http://la.nvidia.com/object/what-is-gpu-computing-la.html> (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <https://www.profesionalreview.com/2017/06/21/diferencia-la-cpu-la-gpu/> (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <https://www.nucleares.unam.mx/~vieyra/node26.html> (último acceso: 23 de junio de 2018).
- <http://www.eis.uva.es/~qgintro/atom/tutorial-10.html> (último acceso: 9 de julio de 2018).
- <https://tecnologia-informatica.com/la-memoria-ram/> (último acceso: 27 de mayo de 2018).
- Ayres, Frank Jr. *MATRICES, Teoría y problemas resueltos*. McGraw-Hill, 1962.
- densidad electrónica, Teoría del funcional de la. <http://www.fis.cinvestav.mx/~daniel/thELA.pdf> (último acceso: 12 de junio de 2018).
- DENSIDAD, TEORIA DE FUNCIONES DE LA. http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/DensityFunctionalTheory_21556.pdf (último acceso: 14 de junio de 2018).
- Kohn-Sham, Potencial exacto de Kohn-Sham para sistemas finitos fuertementecorrelacionados. Luis Antonio Benítez Moreno. http://ricabib.cab.cnea.gov.ar/519/1/1Benitez_Moreno.pdf (último acceso: 14 de junio de 2018).
- Schrödinger, Sobre la ecuación de. <http://www.ugr.es/~jllopez/Cap3-Sch.pdf> (último acceso: 14 de junio de 2018).
- SHOLL, DAVID S. *DENSITY FUNCTIONAL THEORY. A Practical Introduction*. National Energy Technology Laboratory: Georgia Institute of Technology, 2009.
- Urriolabeitia, Esteban. «La teoría del funcional de la densidad (DFT) va por el mal camino.» *divulgame.org*, enero 2017.

Anexos

El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi. El veloz murciélago hindú comía feliz cardillo y kiwi.