UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MÁTEMATICAS 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

Ciudad Universitaria, CDMX **2018**

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

Introducción

La computación como herramienta que auxilia a la ciencia

Durante las ultimas décadas ha incrementado el interés en la computación paralela, el principal objetivo de ella es el incrementar la velocidad de computación.
Desde una perspectiva de puros cálculos, la computación paralela puede definirse en esos muchos cálculos que se resuelven simultáneamente, y como atacan problemas muy largos y los dividen en unos mucho mas pequeños que pueden ser resueltos concurrentemente.

Actualmente el paralelismo se ha convertido en la correine que todo el mundo de la programación esta siguiendo. Existen dos principales tipos de paralelismo en aplicaciones la paralelización de tareas y la paralelización de datos. La primera surge cuando hay muchas tareas que pueden operar independientemente en paralelo, por ello el paralelismo de tareas se enfoca en la distribución de las funciones en los distintos núcleos de procesamiento. Lasegunda entra cunado existen muchos datos que pueden ser operados al mismo tiempo, por ello es mejor distribirlos entre los diversos procesadores.

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.

Como ya se observo, 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.

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.

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 está.

Los cuerpos están formados por partículas, y estas a su vez por moléculas y átomos. Las moléculas pueden estar formadas por átomos de la misma naturaleza (elementos) o diferente naturaleza (compuestos).

1.1.1 Átomo

La partícula más pequeña que compone a la materia, esta a su vez en subpartículas llamadas protones (+) y neutrones (+/-) que se encuentran en el núcleo y por los electrones (-) que se encuentran girando alrededor de este.

1.1.2 Elemento

La sustancia de la cual no se puede, por medios químicos, obtener otra mas sencilla. Es la menor cantidad de átomos que puede existir en libertad.

1.1.3 Molécula

Es la unión estable de varios átomos (iguales o diferentes), mediante las fuerzas de valencia, siendo la porción mas simple de materia que conserva sus propiedades y se representa con formulas químicas. Es electrónicamente neutra ya que se comporta como una sola partícula. Las moléculas se pueden descomponer para separar los elementos que las componen por métodos químicos.

1.1.4 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 atomísticas[1] 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.
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

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

múltiples enteros de un quantum[2] de energía. La constante de Planck vincula el valor de la energía a la frecuencia de la radiación:

$$E = hf$$
$$E = energía\ de\ la\ frecuenicia$$
$$h = 6.63x10^{-34}\ [Js]\ (cte\ de\ Planck)$$
$$f = frecuencia\ de\ onda$$

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 limite fijado en la constante de Planck.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$$
$$\Delta x = indeterminación\ de\ la\ posición$$
$$\Delta p_x = indeterminación\ de\ la\ cantidad\ de\ movimiento$$
$$h = constante\ de\ Planck$$

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 fungen como una nube de carga, y por otro lado para los electores, 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 computo, 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:

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

- 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.

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

$$\Psi = función\ de\ onda$$
$$m = masa\ del\ electrón$$
$$\hbar = constante\ de\ Planck$$
$$E = energía\ total\ del\ electrón$$
$$V = energía\ potencial\ del\ electrón$$

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 funcionales[3] de la densidad electrónica. Estos métodos usan el 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

[3] Funciones de funciones

esperado del estado base de cualquier observable[4] Ô es único funcional de la densidad electrónica exacta del estado base:

$$< \Psi \left| \hat{O} \right| \Psi \geq O\ [\rho]$$

- *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:

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

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

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:

$$E = E^T + E^V + E^J + E^{XC}$$

$$E^T = energía\ cinética\ electrónica$$

$$E^V = energía\ de\ atracción\ núcleo - electrón$$

$$E^J = energía\ de\ repulsión\ electrón - electrón$$

$$E^{XC} = energía\ potencial\ de\ correlación\ e\ intercambio$$

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.

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

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 Generealidades

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

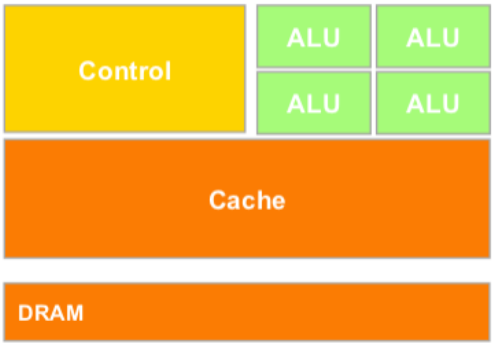
CPU son las siglas en ingles de Central Processing Unit (Unidad de Proceso Central). Es el componente que procesa todas las instrucciones y datos del software y el hardware motivo por el cual constituye el elemento mas importante de la computadora.

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 memora 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 pude representar como:

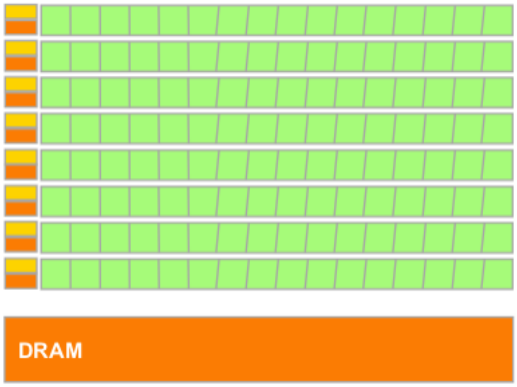


2.3 GPU

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 pude representar como:



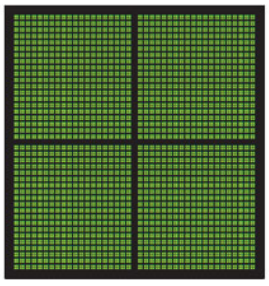
El CPU para operaciones secuenciales en cambio, Las GPU son diseñadas como computadoras especializadas para el cómputo numérico.

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

CPU
MULTIPLE CORES

Multicores: Mejorar el desempeño de soluciones secuenciales.

Manycores: Optimizar el throughput[5] de muchos threads ejecutados en paralelo.



GPU
THOUSANDS OF CORES

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

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:

2.3.1.1Tarjetas dedicadas

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 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.

Capitulo 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.

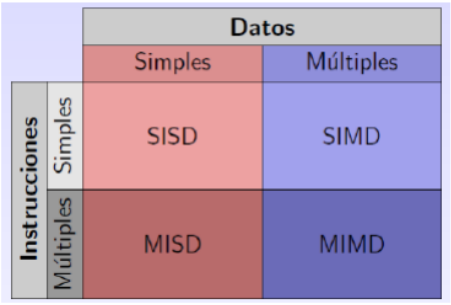
2.3 Ejecución de instrucciones

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.

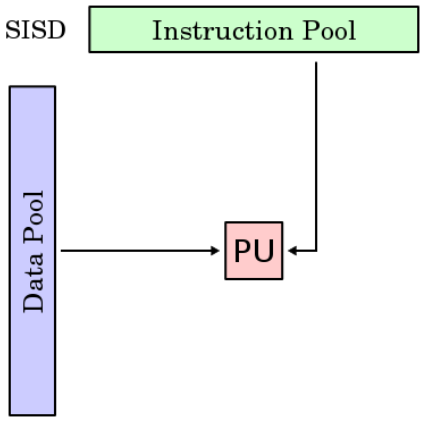
2.4 Taxonomía de Flynn

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.



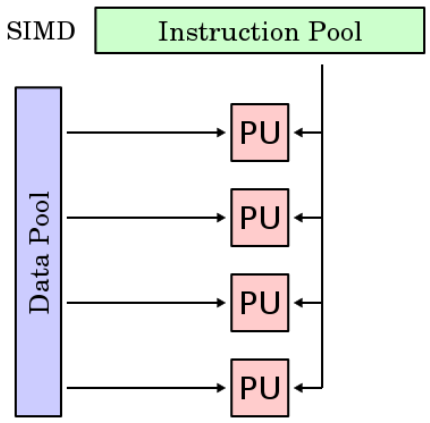
2.4.1 SISD: Single Instruction, Single Data

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 extendid



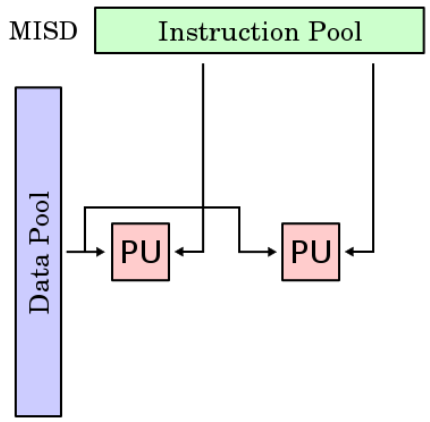
2.4.2 SIMD: Single Instruction, Multiple Data

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.



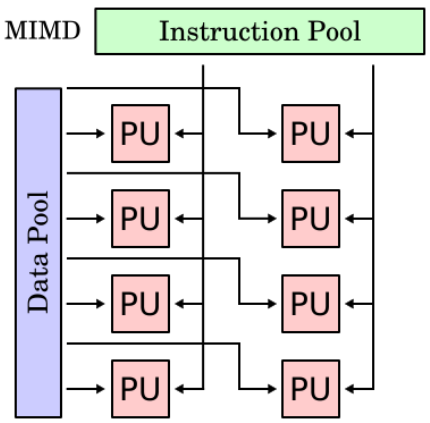
2.4.3 MISD: Multiple Instruction, Single Data

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).

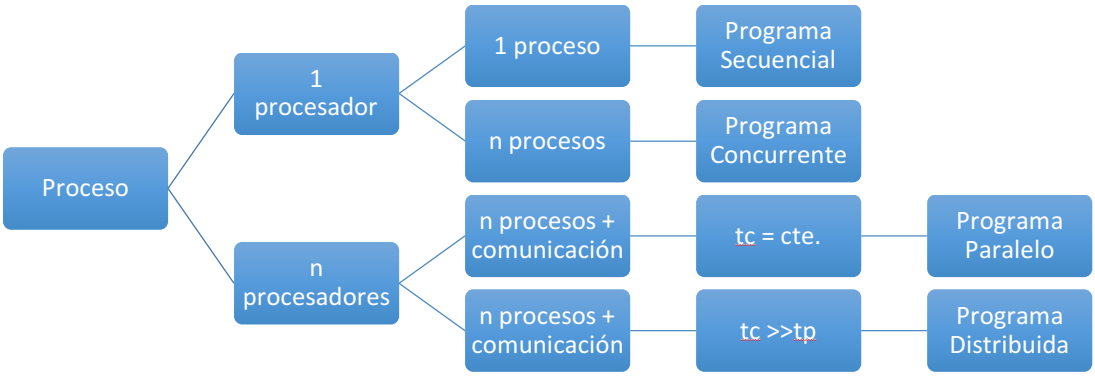
Los hilos de ejecución que comparten los mismos recursos, son en conjunto conocidos como un proceso.
Cuando un hilo modifica un dato en la memoria, los otros hilos pueden acceden a ese dato modificado inmediatamente.

2.5.6 Variable compartida

La variable compartida o también llamada variable global, es aquella que todos los procesos concurrentes pueden ver y escribir, por lo que es necesario tener mucho cuidado sobre quien esta utilizándola en que momento.

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 Computación Paralela

Durante las ultimas décadas ha incrementado rl interés en la computación paralela, el principal objetivo de ella es el incrementar la velocidad de computación.

Desde una perspectiva de puros cálculos, la computación paralela puede definirse en esos muchos cálculos que se resuelven simultáneamente, y como atacan problemas muy largos y los dividen en unos mucho mas pequeños que pueden ser resueltos concurrentemente.

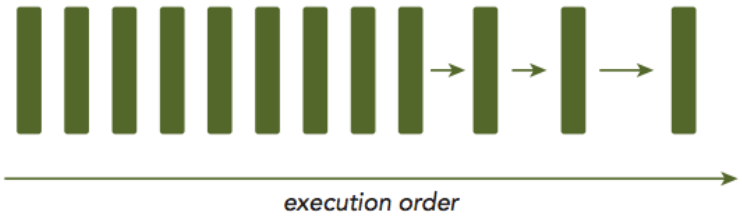
Los aspectos de software y de hardware están muy interrelacionados y pueden distinguirse dos áreas, por un lado en cuanto a hardware tenemos la arquitectura de la computadora, y por el otro en el campo del software tenemos la programación paralela.

La arquitectura de la computadora se encarga de proveer el espacio para que las cosas paralelas funcionen, dota de los dispositivos para que se puedan utilizar en cierto momento. Mientras que la programación paralela se encarga completamente de resolver los problemas utilizando el poder que se provee en la arquitectura computacional.

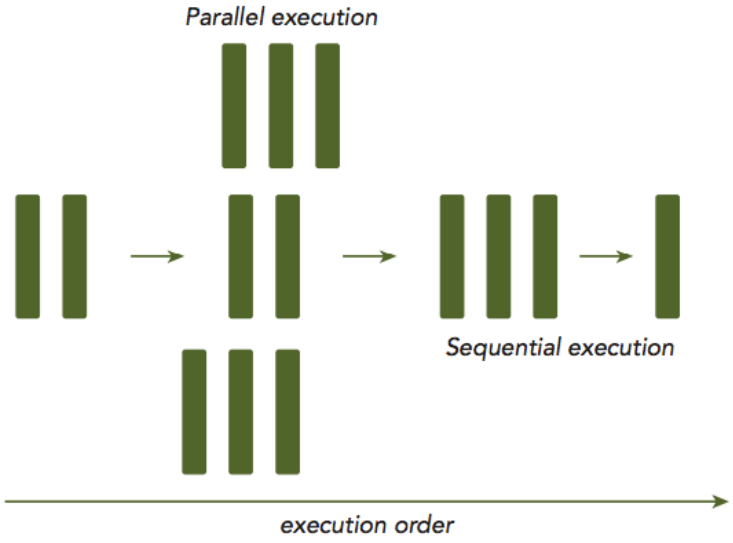
Cuando se implementan algoritmos secuenciales, no es necesario comprender los detalles de la arquitectura de la computadora para escribir programas correctos, sin embargo, cuando se implementan algoritmos para maquinas multicore es necesario conocer las características de las maquinas para saber con que recursos cuentan para poder realizar programas tanto correctos como eficientes.

2.7.1 Programación secuencial y paralela

Cuando se resuelven problemas con programas de computo, lo mas natural es dividir el problema en una serie de cálculos, llamadas tareas, para ejecutarlas paso a paso.



Un programa básicamente consiste de dos elementos básicos, las instrucciones y los datos. Cuando un problema esta dividido en pequeñas tareas es necesario saber si existe alguna dependencia de datos entre ellas y agruparlas. El análisis de las dependencias es una característica principal a tomar en cuenta cuando se quieren realizar algoritmos paralelos. Cuando se tengan identificadas tosa las dependencias se puede proceder a realizar la paralelización correcta y empezar a utilizar los recursos de harware en donde se piensa implementar.



Hay que estar consientes de que aunque se quiera paralelizar completamente el algoritmo, siempre habrá una sección serial que inevitablemente estará presente, y es imposible

quitarla, por ello es necesario optimizar lo que más se pueda todas las secciones del código para acelerar la resolución del problema.

Existen dos principales formas de descomponer los problemas, esto dependerá de la naturaleza propia de los problemas.

2.7.1.1 Descomposición funcional

En la descomposición funcional o paralelismo de tareas el problema es dividido en un gran número de partes más pequeñas y dichas subtareas son asignadas a los procesadores disponibles. Para así ayudar a procesar los diferentes requerimientos por separado. Tan pronto como un procesador termina una subtarea, recibe otra subtarea hasta que queden resueltas todas. La desventaja de este tipo de descomposición radica en que es necesario que la comunicación sea no buffereada y así esperar hasta que se reciba completamente el dato para enviar la nueva información.

2.7.1.2 Descomposición de dominio

También llamada paralelismo de datos, divide los datos en partes de aproximadamente el mismo tamaño y las cuales son asignadas a diferentes procesadores para así trabajar sólo con la parte de datos que le toca. Esta estrategia puede ayuda a dividir los datos con el mismo algoritmo para burlar los cuellos de botella que puedan provocar cada uno de lo lotes de información, ya que cada uno puede ser distinto o el tipo de dato requiere más o menor tiempo en ser resuelto. En tal caso el tiempo de ejecución es determinado por el proceso que tarde más, sin importar que los demás procesadores permanezcan ociosos (idle).

2.7.2 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.

La dependencia de datos ocurre cuando una instrucción consume datos que son producidos por una instrucción anterior, por lo que si no esta sincronizada la ejecución puede supone un cuello de botella al necesitar esperar hasta que se tenga el recurso necesario para continuar con el procedimiento.

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

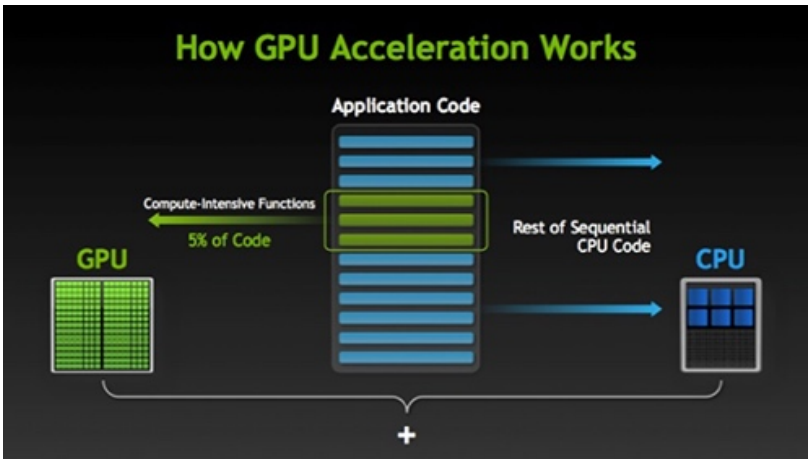
Algoritmo que se está implementando ya no da para más, se ha llegado al tope de opciones paralelas.

Teniendo en cuenta lo anterior, ahora pasemos a las limitaciones en cuanto a software. Aquí surge un concepto llamado condición de competencia, el cual ocurre cuando dos o más procesos buscan modificar una variable compartida, por ello hay que tener mecanismos de protección para evitar que se corrompa la información u ocurra el llamado deadlock, y esto sucede cuando los procesos se bloquean entre si, y ambos se quedan esperando un estado que nunca sucederá, como por ejemplo que ninguno tenga el recurso pero detecten que el otro lo está ocupando y aguarden a que se libere.

Es necesario garantizar a los procesos una eventual entrada a la solución de la tarea, sino no tendría sentido realizarla. Es muy importante asegurar la vitalidad de todos los procesos, lo que significa que todos ellos deben tener la oportunidad de consumir los recursos para poder avalar que el programa terminará y no se quedara en espera infinita.

2.8 Cómputo en GPU

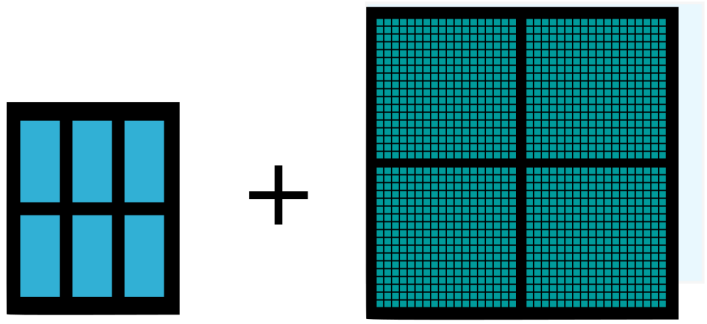
El computo en GPU o también llamado GPGPU (cómputo de propósito general en unidades de procesamiento de gráficos) es utilizada para acelerar el computo realizado tradicionalmente por únicamente la CPU, donde la GPU actúa como un coprocesador que puede acelerar el trabajo donde la computación es más intensiva aprovechando enorme potencia de procesamiento paralelo, mientras que el resto del código se ejecuta en la CPU.



2.8.1 Diferencia entre CPU y GPU

El CPU es un procesador de propósito general, lo que significa que puede hacer cualquier tipo de calculo, pero esta diseñada para realizar el procesamiento en serie. Aunque se pueden utilizar bibliotecas para realizar concurrencia y paralelismo, el hardware per se no tiene esa implementación.

El GPU es un procesador mucho más especializado para tareas que requieren de un alto grado de paralelismo. La tarjeta grafica en su interior contiene miles de núcleos de procesamiento que son más pequeños y que por ende realizan un menor número de operaciones. Esto hace que la GPU esté optimizada para procesar cantidades enormes de datos pero con programas más específicos. Lo más común al utilizar la aceleración por GPU es ejecutar una misma instrucción a múltiples datos para aprovechar su arquitectura.



Es necesario destacar que los manycore y los multicore son utilizados para etiquetar a los CPU y los GPU, pero no entre ellos son un poco diferentes. Un core de CPU es relativamente más pesado, está diseñado para realizar un control lógico muy complejo para buscar y optimizar la ejecución secuencial de programas. En cambio un core de GPU es más ligero y está optimizado para realizar tareas de paralelismo de datos como un control lógico simple enfocándose en el throughput de los programas paralelos.

Con aplicaciones computacionales intensivas, las secciones del programa a menudo muestran una gran cantidad de paralelismo de datos. Las GPU se usan para acelerar la ejecución de esta porción de paralelismo de datos. Cuando un componente de hardware que está físicamente separado de la CPU se utiliza para acelerar secciones computacionalmente intensivas de una aplicación, se lo denomina acelerador de hardware. Se puede decir que las GPU son el ejemplo más común de un acelerador de hardware.

2.8.2 Cómputo Heterogéneo

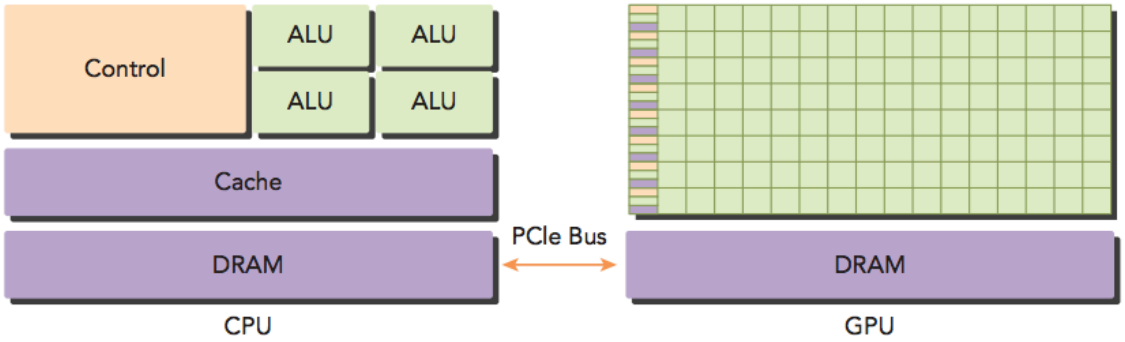
El cambio de sistemas homogéneos a sistemas heterogéneos es un paso muy importante en la historia del cómputo de alto rendimiento. La computación homogénea utiliza uno o más procesadores de la misma arquitectura para ejecutar una aplicación. En cambio, el cómputo heterogéneo usa un conjunto de procesadores con diversas arquitecturas para ejecutar un programa, aplicando tareas a las arquitecturas que son más adecuadas, produciendo una mejora en el rendimiento como resultado.

Aunque los sistemas heterogéneos proporcionan ventajas significativas en comparación con el alto rendimiento tradicional, el uso efectivo de tales sistemas está actualmente limitado por el aumento de complejidad en el diseño de una solución.

Normalmente los CPU y los GPU están conectados por el bus de PCI-Express en un nodo de computo, aquí a la tarjeta gráfica se les conoce como Device, y al CPU al ser el que se encarga de dar las instrucciones al GPU, se lo conoce como Host.

Actualmente, un nodo de procesamiento heterogéneo típico consiste en dos socket de CPU multicore y uno o más GPU manycore.

Actualmente, una GPU no es una plataforma independiente sino un coprocesador de un CPU. Por lo tanto, las GPU deben operar en conjunto con un host basado en CPU a través de un bus PCI-Express



Una aplicación heterogenea consiste de dos partes, el código Host que corre en el CPU, y el código Device que corre en el GPU. Un programa que corre en una plataforma heterogénea es indudablemente iniciada por el CPU, el código del CPU es rl responsable de manejar el ambiente, código y datos para el device antes de realizar las tareas intensivas en la tarjeta gráfica.

2.9 Tecnología de Gráficos

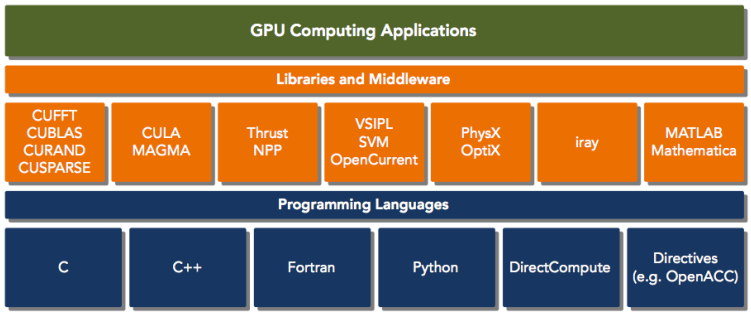
Por que utilizar cuda

Los GPU, según la taxonomía se Flynn, están en el campo del paralelismo del tipo MIMD (Multiple Instruction, Multiple Data) y en el de SIMD: Single Instruction, Multiple Data. EL GPU y el CPU no comparten el mismo ancestro. Históricamente los GPU son coprocesadores aceleradores de gráficos, pero recientemente estos están evolucionando a para ser mas poderosos y de propósito general, son completamente programables y están ganando su lugar en los problemas de computo paralelo masivo.

……..

CUDA es una plataforma de cómputo paralelo de uso general y un modelo de programación que aprovecha el motor de cómputo paralelo en las GPU de la marca NVIDIA para resolver muchos problemas computacionales complejos de una manera más eficiente. Usando CUDA, puede acceder a la GPU para el cálculo, como se ha hecho tradicionalmente en la CPU.

Se puede acceder al cómputo con la plataforma CUDA a través de bibliotecas aceleradas propias de CUDA, directivas de compilación, interfaces de programación de aplicaciones y extensiones de lenguajes de programación estándar de la industria, incluidos los más importantes en el desarrollo del cómputo científico, como lo son C, C ++, Fortran y Python.



2.9.1 Todd Rodriguez

Por que utilizar C

2.10 CUDA

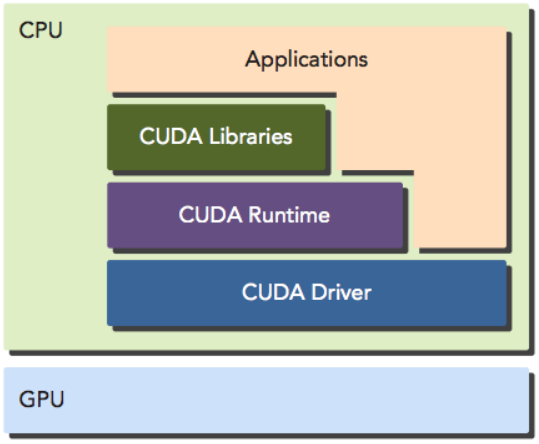
CUDA es una arquitectura de hardware y de software que permite ejecutar programas en las tarjetas gráficas de la marca NVIDIA. La programación en CUDA es adecuada para resolver problemas que pueden ser expresados en paralelismo de datos, por la arquitectura que manejan.

Se explicará el caso particular de la extensión de CUDA en C, ya que es el lenguaje en el que la implementación del algoritmo se realizará.

2.10.2 Arquitectura CUDA

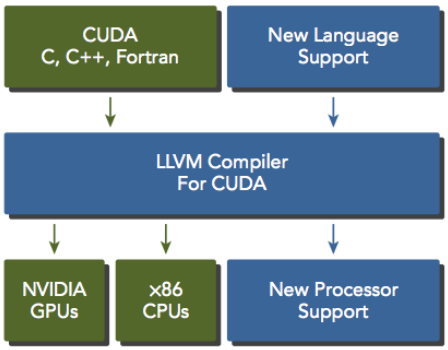
CUDA C es una extensión del estándar ANSI C con varias extensiones del lenguaje para utilizar la programación heterogénea y también API sencillas para administrar los dispositivos, memoria y otras tareas. CUDA también es un modelo de programación escalable que permite a los programas trabajar con un número variable de núcleos transparentemente, aumentando o disminuyendo el numero de cores.

CUDA nos provee dos niveles de API para manejar el GPU y organizar los threads. El *API driver* es un API de nivel bajo y es un poco difícil de programar, pero provee un control sobre como el dispositivo (GPU) está siendo usado. El *API runtime* es un API a un nivel mas alto, cada función de esté nivel se rompe en operaciones mas básicas del API driver.



Un programa en CUDA consiste en la mezcla de dos códigos, el host code y el device code. El compilador de NVIDIA, *nvcc*, separa ambos códigos durante el proceso de compilación. Durante la etapa de enlace, las librerías de CUDA se agregan al procedimiento de las funciones que irán al device para poder manipular completamente la tarjeta.

El compilador nvcc esta basado en LLVM[6], por lo que el lenguaje puede ser extendido creando nuevos soportes para el GPU, eso si, utilizando el CUDA Compiler SDK que nos comparte NVIDIA.



2.10.2 Estructura CUDA

Consta de cuatro principales componentes: kernel, threads, bloques y grids.

2.10.2.1 Kernel

Son las funciones paralelas escritas en en el programa que indican que operaciones se realizaran en el GPU.

[6] LLVM (Low Level Virtual Machine) es una plataforma para desarrollar compiladores, que está diseñada para optimizar el tiempo de compilación, el tiempo de enlazado y el tiempo de ejecución en cualquier lenguaje de programación.

2.10.2.2 Thread

Un thread de un bloque ejecuta una instancia de un kernel. Tiene su propio id dentro de su bloque, su propio PC, registros, memoria privada, entradas y salidas.

2.10.2.3 Bloque

Un bloque es un conjunto de threads concurrentes que pueden cooperar entre ellos, sincronizarse y comparten memoria. Un bloque tiene su propio id dentro del grid.

2.10.2.4 Grid

Un grid es un arreglo de bloques de threads que ejecutan el mismo kernel, leen entradas desde memoria global, escriben resultados en memoria global, y se sincronizan entre otras llamadas a kernels.

El modelo de programación CUDA permite ejecutar aplicaciones en sistemas heterogéneos simplemente anotando el código con un pequeño conjunto de extensiones para el lenguaje de programación C, pero es importante decir que tanto el host como el device tienen memoria independiente, por lo que para acceder a los datos del otro es necesario enviar la información. Para ayudar a diferenciar entre que variables están en el host y en el device, se recomienda empezar los nombre con *h_* para las del primero y *d_* para el segundo.

Un componente clave del modelo de programación de CUDA es el kernel, ya que se puede expresar un kernel como un programa secuencial, pero en realidad, CUDA administra la programación de ellos y los asigna a los threads . La nomenclatura de un kernel es parecida a la de una función, pero hay que agregar la directiva __global__ (doble guion bajo a cada lado. Para diferenciarlas de las funciones del host, se sugiere que empiecen con *kernel_*. Un ejemplo de esto podría ser:

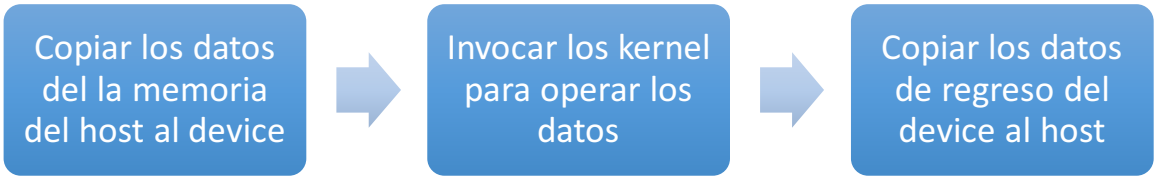
__global__ void kernel_helloFromGPU(argument list){}

Para poder lanzar el kernel, se debe utilizar la nomenclatura siguiente:

kernel_name <<<grid, block>>>(argument list);

El host puede operar independientemente del dispositivo, ya que, cuando se ha lanzado un kernel, el control se devuelve inmediatamente al host liberando a la CPU para realizar tareas adicionales complementadas por el código paralelo de datos que se ejecuta en el dispositivo. El modelo de programación de CUDA es principalmente asincrónico, por lo que el cómputo del device puede superponerse con el procesamiento del dispositivo host y realizar actividades al mismo tiempo.

El proceso típico del flujo de datos de un programa en CUDA sigue el siguiente patrón:



2.10.3 Manejo de memoria

Al diseñar un programa en paralelo con partición de datos, es necesario que dichos datos sean enviados a cada thread para que trabajen con ese pedazo de datos. Generalmente existen dos tipos de partición, la partición por bloques y la partición cíclica. En la partición por bloque muchos elementos consecutivos son empaquetados juntos, cada paquete es asignado a un thread en orden, por lo que cada thread procesa un paquete a la vez. En cambio la partición cíclica tiene menos datos empaquetados juntos, al terminar solicitan más pedazos de información, por ello pueden ir saltando entre los datos.

Block partition: each thread takes one data block

Cyclic partition: each thread takes two data blocks

Usualmente los datos están guardados en una dimensión, aunque el punto de vista del problema requiera una visualización multidimensional. Determinar el cómo distribuir datos entre threads está estrechamente relacionado con la forma en que los datos se almacenan físicamente, así como orden de ejecución de cada uno. La forma de organización de los threads tiene un efecto significativo en el rendimiento del programa.

Block partition on one dimension

Block partition on both dimensions

Cyclic partition on one dimension

El modelo de programación CUDA supone un sistema compuesto por un host y un dispositivo propia memoria separada entre si. El tiempo de ejecución de CUDA proporciona funciones para asignar y liberar memoria del dispositivo y transferir datos entre la memoria del host y la memoria del dispositivo.

Aquí hay una tabla que muestra las funciones correspondientes a C y a CUDA C para administrar la memoria

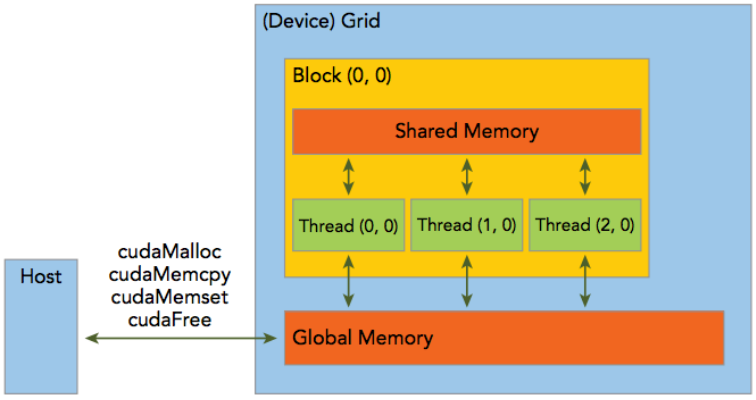
Funciones estándar de C	Funciones de CUDA C
malloc	*cudaMalloc*
memcpy	*cudaMemcpy*
memset	*cudaMemset*
free	*cudaFree*

La función utilizada para transferir datos entre el host y el device es cudaMemcpy, pero es necesario indicar cual es la fuente y el destino.

cudaMemcpyHostToDevice
cudaMemcpyDeviceToHost

```
cudaMemcpy(d_a, h_a, nBytes, cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(h_b, d_b, nBytes, cudaMemcpyDeviceToHost);
```

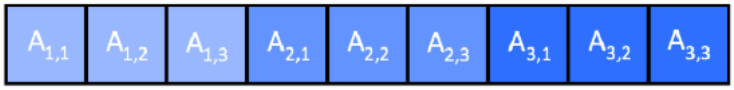
Esta función tiene un comportamiento síncrono, ya que el host se bloquea hasta que la función regrese una bandera de que la transferencia se realizo con éxito.



2.10.3.1 Trabajando con matrices

Cuando se trabaja con matrices en CUDA es necesario convertirlas a arreglos de una dimensión. Esto puede sonar un poco confuso, pero el problema es el lenguaje lenguaje en si, ya que necesita saber el numero de columnas que se tendrán antes de compilar el programa, lo que hace imposible cambiarlo en la mitad del código. Por ello no podemos utilizar la notación de *A[i][j]* si no que debemos utilizar una manera para indexar correctamente entre renglones y columnas.

Lo mas fácil para convertir una matriz a un arreglo es desdoblar cada renglón en serie.



Pasando así de *A[i][j] a Am[i*N+j],* donde i representa el renglon, j la columna y N el numero total de columnas

Capítulo 3. Algoritmo de Jacobi

3.2.1 Forma cuadrática

Todo polinomio de segundo grado homogéneo de la forma:

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

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

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

$$q(x_1, x_2, \cdots, x_n) = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = X'AX$$

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.

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

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

3.2.2 Eigensistemas

En muchos problemas en matemáticas aplicadas, es necesario el resolver ecuaciones lineares 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 *nxn* 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 $\overline{x_1}$ y $\overline{x_2}$ con el mismo origen, tenemos que el vector $\overline{OD}$ tiene las dos diferentes componentes mencionadas. Trigonométricamente tenemos:

$$x_1 = \overline{x_1} cos\theta - \overline{x_2} sen\theta$$
$$x_2 = \overline{x_1} sen\theta + \overline{x_2} cos\theta$$

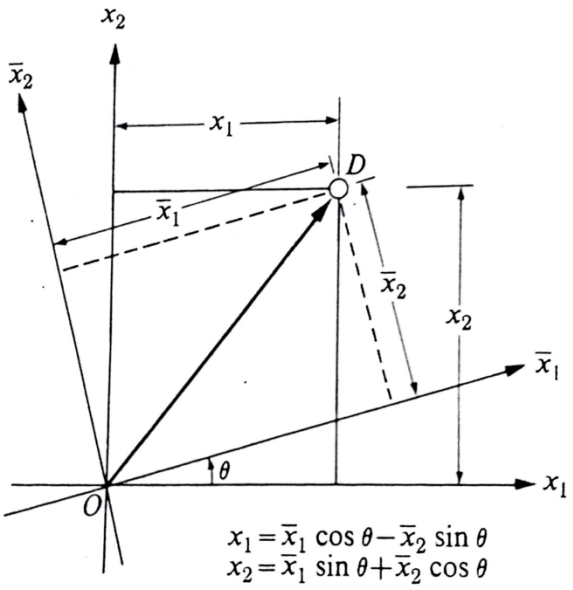
o en la forma matricial

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} cos\theta & -sen\theta \\ sen\theta & cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x_1} \\ \overline{x_2} \end{bmatrix}$$

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

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

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.

$$B = \begin{bmatrix} cos\theta & -sen\theta \\ sen\theta & cos\theta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} cos\theta & -sen\theta \\ sen\theta & cos\theta \end{bmatrix}$$

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

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

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

por identidades trigonométricas podemos concluir

$$tan2\theta = \frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}}$$

Dando como resultado esperado

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

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 23).

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).

https://www.profesionalreview.com/2017/06/21/diferencia-la-cpu-la-gpu/ (último acceso: 12 de mayo de 2018).

Ayres, Frank Jr. *MATRICES, Teoria 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.