

Computación Eficiente en la Ciencia... y cómo no morir en el intento



Cecilia Jarne

Graciela Molina

Pablo Alcain

Rodrigo Lugones

Sobre nuestro trabajo

Cursos en Técnicas de Programación Científica

- 2015/NOV. Servicio Meteorológico Nacional

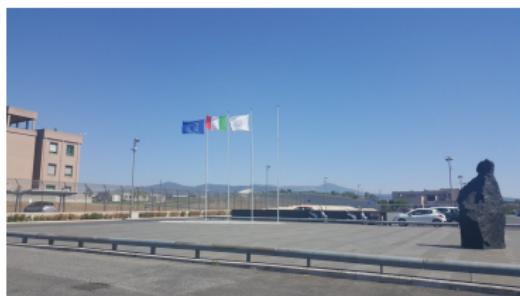
Cursos en Técnicas de Programación Científica

- 2015/NOV. Servicio Meteorológico Nacional
- 2016/NOV. Curso de Posgrado UNQ

Sobre nuestro trabajo

Cursos en Técnicas de Programación Científica

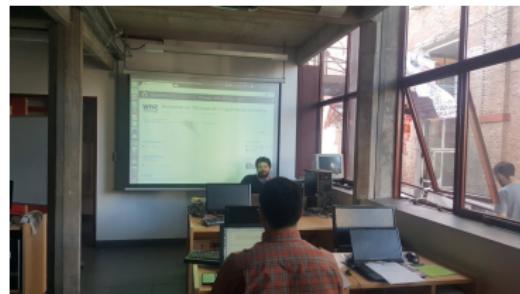
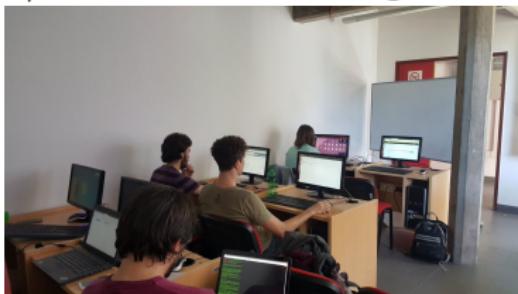
- 2015/NOV. Servicio Meteorológico Nacional
- 2016/NOV. Curso de Posgrado UNQ
- 2017/JUL. Agenzia Spaziale Italiana



Sobre nuestro trabajo

Cursos en Técnicas de Programación Científica

- 2015/NOV. Servicio Meteorológico Nacional
- 2016/NOV. Curso de Posgrado UNQ
- 2017/JUL. Agenzia Spaziale Italiana
- 2017/NOV. Curso de Posgrado UNQ



Sobre nuestro trabajo

Workshops en Técnicas de Programación Científica

- 2016/MAR. WTPC16 - UBA (\sim 100 aspirantes)



Sobre nuestro trabajo

Workshops en Técnicas de Programación Científica

- 2016/MAR. WTPC16 - UBA (\sim 100 aspirantes)
- 2017/MAR. WTPC17 - UNT (\sim 60 aspirantes)



Sobre nuestro trabajo

Workshops en Técnicas de Programación Científica

- 2016/MAR. WTPC16 - UBA (~ 100 aspirantes)
- 2017/MAR. WTPC17 - UNT (~ 60 aspirantes)
- 2018/MAR. WTPC18 - UNQ (~ 60 aspirantes)



Presentaciones

- 2017/SEP. Reunión Nacional de la Asociación de Física Argentina

Sobre nuestro trabajo

Presentaciones

- 2017/SEP. Reunión Nacional de la Asociación de Física Argentina
- 2017/NOV. PyData, San Luis



Sobre nuestro trabajo



Nuestra motivación

- Dirigido a **investigadores en formación y grupos de investigación ya consolidados**
- Ofrecer instrumentos más formales para el desarrollo de software científico de calidad
- Mostrar como filosofía el trabajo colaborativo y uso de herramientas *open source*

Nuestra motivación

- Dirigido a **investigadores en formación y grupos de investigación ya consolidados**
- Ofrecer instrumentos más formales para el desarrollo de software científico de calidad
- Mostrar como filosofía el trabajo colaborativo y uso de herramientas *open source*

Nuestra motivación

- Dirigido a **investigadores en formación y grupos de investigación ya consolidados**
- Ofrecer instrumentos más formales para el desarrollo de software científico de calidad
- Mostrar como filosofía el trabajo colaborativo y uso de herramientas *open source*

Sobre nuestros objetivos

Transferir nuestras experiencias para aquellos grupos que necesiten:

- Estrategias y buenas prácticas al momento de diseñar e implementar software científico de calidad
- Escribir programas optimizados
- Escribir programas adecuados al hardware disponible.
- Tomar decisiones al momento de invertir en hardware.

Sobre nuestros objetivos

Transferir nuestras experiencias para aquellos grupos que necesiten:

- Estrategias y buenas prácticas al momento de diseñar e implementar software científico de calidad
- Escribir programas optimizados
- Escribir programas adecuados al hardware disponible.
- Tomar decisiones al momento de invertir en hardware.

Sobre nuestros objetivos

Transferir nuestras experiencias para aquellos grupos que necesiten:

- Estrategias y buenas prácticas al momento de diseñar e implementar software científico de calidad
- Escribir programas optimizados
- Escribir programas adecuados al hardware disponible.
- Tomar decisiones al momento de invertir en hardware.

Sobre nuestros objetivos

Transferir nuestras experiencias para aquellos grupos que necesiten:

- Estrategias y buenas prácticas al momento de diseñar e implementar software científico de calidad
- Escribir programas optimizados
- Escribir programas adecuados al hardware disponible.
- Tomar decisiones al momento de invertir en hardware.

¿Qué es HPC?

- High Performance Computing (Computación de Alto Desempeño)
- OK, pero... ¿qué quiere decir **alto**?
- Para ver si algo es de alto desempeño tenemos que compararlo con otra cosa
- En general, vamos a hablar de HPC cuando nos interese que el resultado sea rápido.
- ¿Cuánto vamos a resignar porque el resultado sea rápido? *Casi todo*

¿Qué es HPC?

- High Performance Computing (Computación de Alto Desempeño)
- OK, pero... ¿qué quiere decir **alto**?
- Para ver si algo es de alto desempeño tenemos que compararlo con otra cosa
- En general, vamos a hablar de HPC cuando nos interese que el resultado sea rápido.
- ¿Cuánto vamos a resignar porque el resultado sea rápido? *Casi todo*

¿Qué es HPC?

- High Performance Computing (Computación de Alto Desempeño)
- OK, pero... ¿qué quiere decir **alto**?
- Para ver si algo es de alto desempeño tenemos que compararlo con otra cosa
- En general, vamos a hablar de HPC cuando nos interese que el resultado sea rápido.
- ¿Cuánto vamos a resignar porque el resultado sea rápido? *Casi todo*

¿Qué es HPC?

- High Performance Computing (Computación de Alto Desempeño)
- OK, pero... ¿qué quiere decir **alto**?
- Para ver si algo es de alto desempeño tenemos que compararlo con otra cosa
- En general, vamos a hablar de HPC cuando nos interese que el resultado sea rápido.
- ¿Cuánto vamos a resignar porque el resultado sea rápido? *Casi todo*

¿Qué es HPC?

- High Performance Computing (Computación de Alto Desempeño)
- OK, pero... ¿qué quiere decir **alto**?
- Para ver si algo es de alto desempeño tenemos que compararlo con otra cosa
- En general, vamos a hablar de HPC cuando nos interese que el resultado sea rápido.
- ¿Cuánto vamos a resignar porque el resultado sea rápido? *Casi todo*

HPC y Ciencias de la Computación

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (!!)

HPC y Ciencias de la Computación

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (!!)

HPC y Ciencias de la Computación

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (!!)

HPC y Ciencias de la Computación

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (!!)

HPC y Ciencias de la Computación

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (!!)

- Históricamente eran lo mismo
- Hoy en día, desarrolladores de HPC no son sólo Lic. en Computación
- Combinación de software viejo con hardware nuevo
- Está muy bueno saber HPC, pero...
 - ... no es fácil. Requiere desarrollar una *intuición*
 - ... ¡no hace falta! Alcanza con saber hablar con un HPCista (??)

¿Dónde se usa HPC?

- Celular
- Laptop
- Computadora de escritorio
- Clúster de computadoras
- Supercomputadora
- Nube

Eficiencia

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

Eficiencia

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

Eficiencia

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

Eficiencia

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

Eficiencia

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

No es sólo que el programa corra rápido

Es que el programa se desarrolle **rápido**

Es que el programa se mantenga **rápido**

Es que el programa se use **rápido**

Que se modifique **rápido**

Que se adapte al hardware **rápido**

Ejemplos de las herramientas *open source*

C



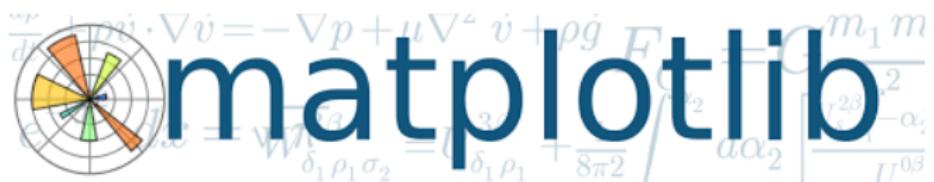
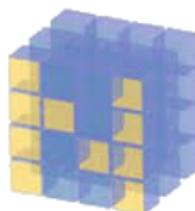
Programming

Fortran

Ejemplos de las herramientas *open source*



Ejemplos de las herramientas *open source*



Ejemplos de las herramientas *open source*

Elección de librerías y *frameworks*



TensorFlow



Keras: The Python Deep Learning library



Keras

Ejemplos de las herramientas *open source*

Elección de librerías y *frameworks*



REGISTRO NACIONAL
DE DATOS GENÉTICOS
FORENSES.



QUANTUM ESPRESSO



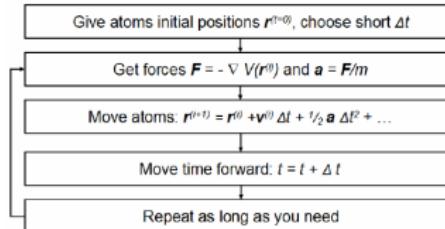
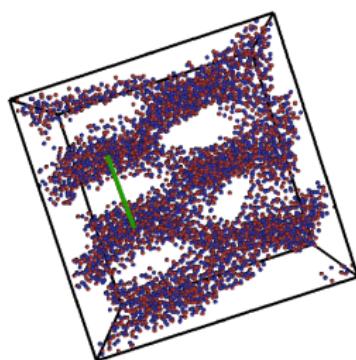
Ejemplos de las herramientas *open source*

Trazabilidad del desarrollo de software



git

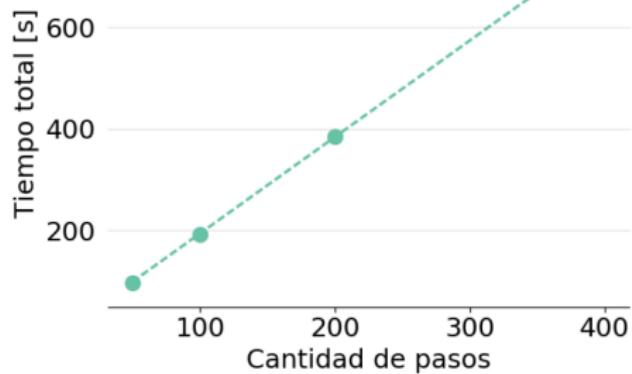
Ejemplo: Optimización del código de interacción de moléculas



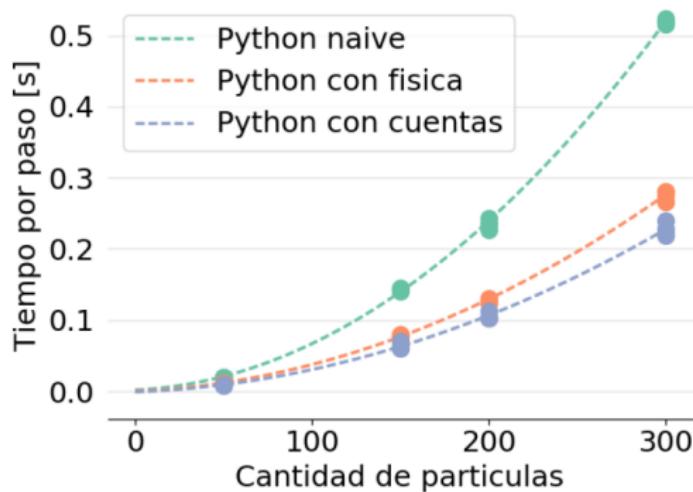
Optimización del código de interacción de moléculas



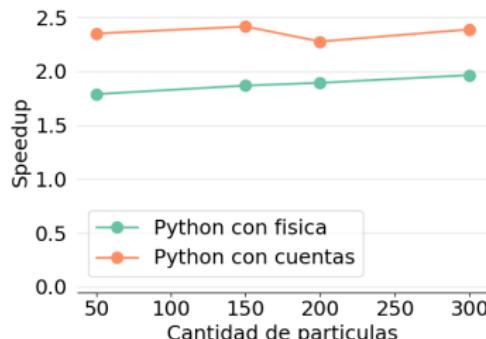
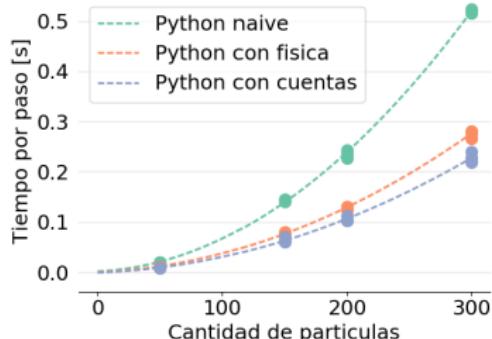
Python *naive*



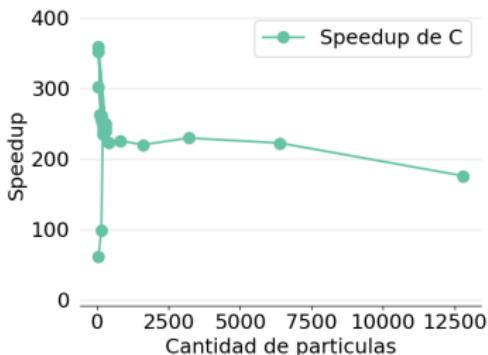
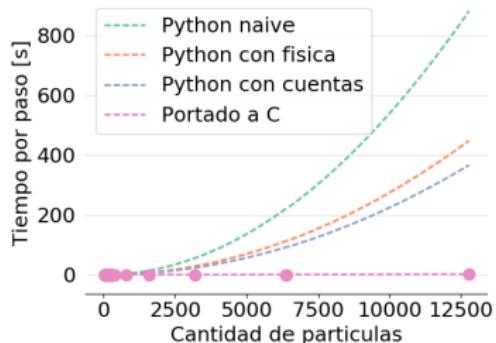
Python con física y con cuentas



Python con física y con cuentas

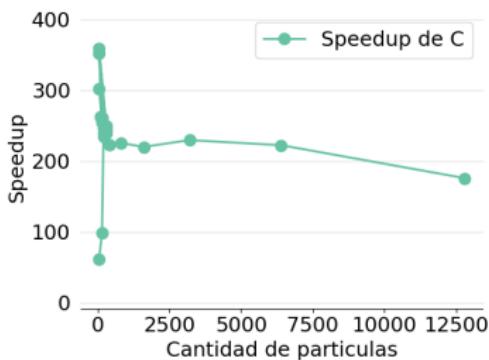
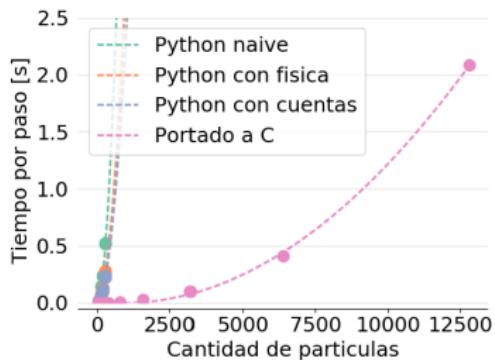


Python y C

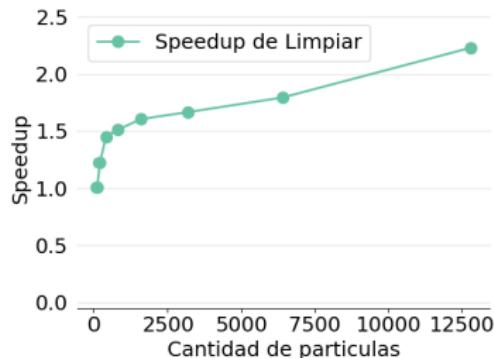
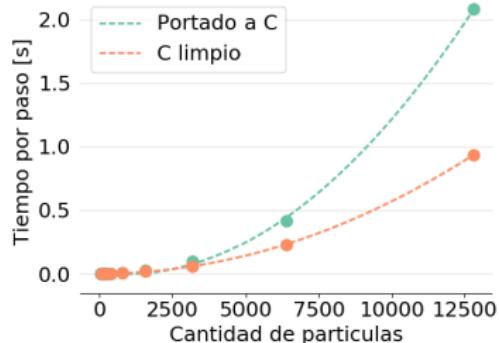


Optimización del código de interacción de moléculas

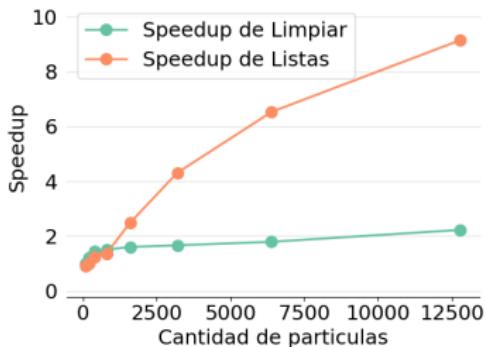
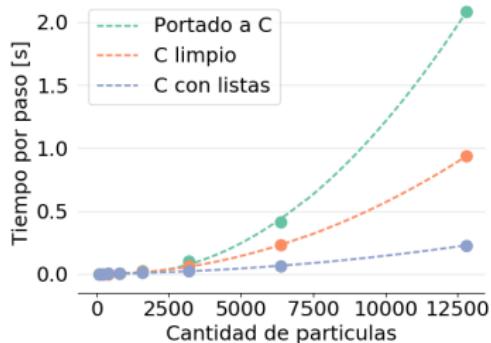
Python y C



Python y C (más limpio)

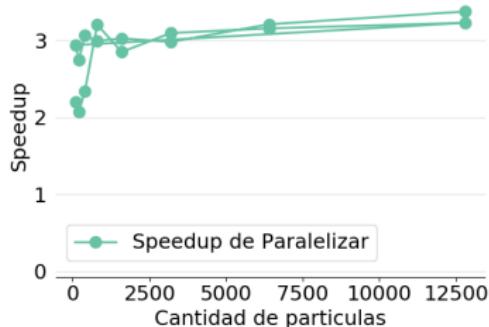
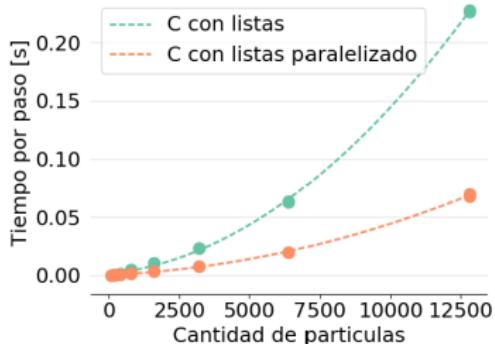


Python y C (listas)

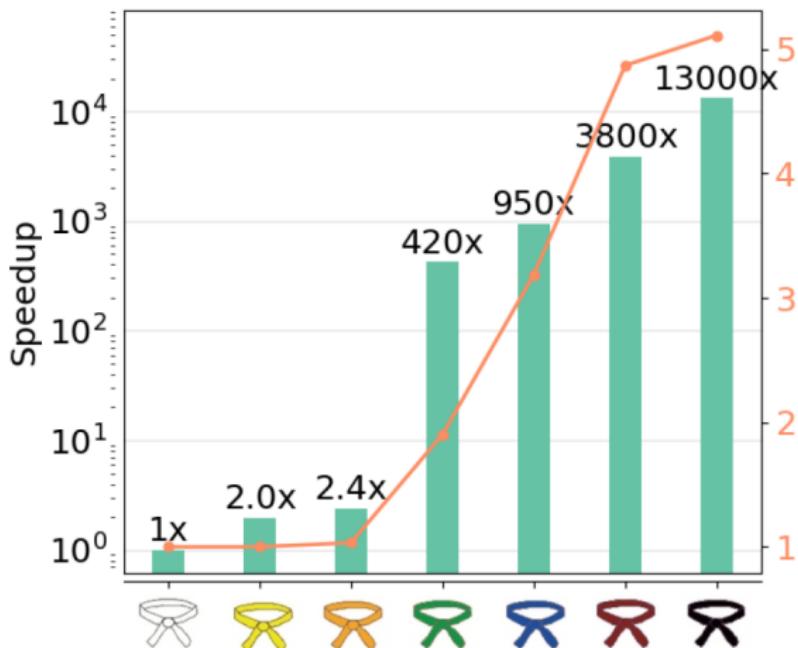


Optimización del código de interacción de moléculas

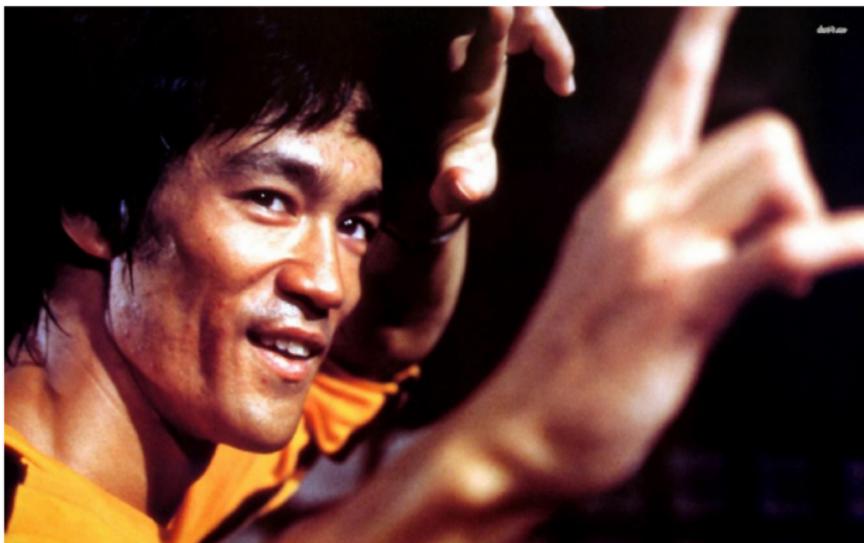
Con paralelización



Optimización del código de interacción de moléculas



Optimización del código de interacción de moléculas



Optimización del código de interacción de moléculas



Conclusions

Los invitamos a nuestro Curso de Posgrado y a aplicar tambien al cuarto Workshop en Técnicas de Programación Científica:

<https://wtpc.github.io/>

 /workshopTPC

 /workshopTPC