

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



Cecilia Jarne

Graciela Molina

Pablo Alcain

Rodrigo Lugones

## Cursos en Técnicas de Programación Científica

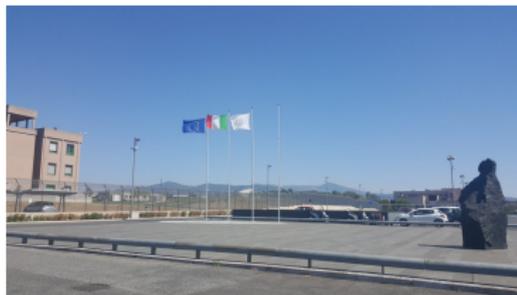
- 2015/NOV. Servicio Meteorológico Nacional

## Cursos en Técnicas de Programación Científica

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

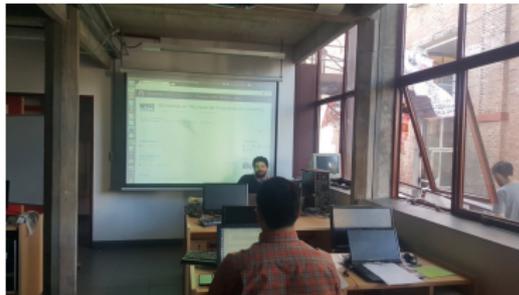
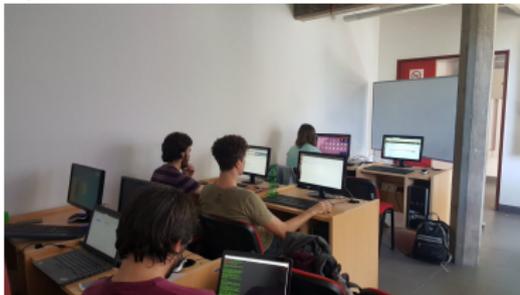
## Cursos en Técnicas de Programación Científica

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



## 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



## Workshops en Técnicas de Programación Científica

- 2016/MAR. WTPC16 - UBA (~ 100 aspirantes)



## Workshops en Técnicas de Programación Científica

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



## 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

## Presentaciones

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



# Sobre nuestro trabajo



- 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*

- 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*

- 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*

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.

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.

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.

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*

- 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 (??)

- 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 (??)

- 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

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**

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**

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**

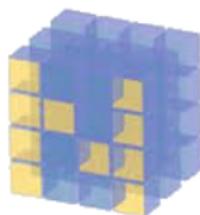
A large, blue, sans-serif letter 'C'.

Programming

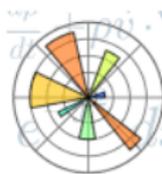
The word 'Fortran' in a large, beige, serif font, centered within a dark brown rectangular background.



# Ejemplos de las herramientas *open source*



NumPy



matplotlib

# Ejemplos de las herramientas *open source*

## Elección de librerías y *frameworks*



Keras: The Python Deep Learning library



# Keras

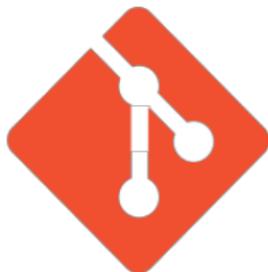
## Elección de librerías y *frameworks*



REGISTRO NACIONAL  
DE DATOS GENÉTICOS  
FORENSES.

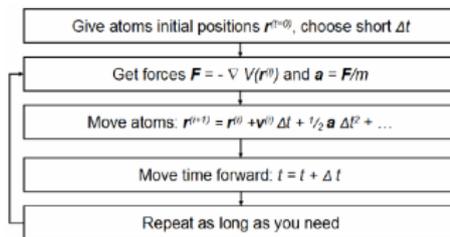
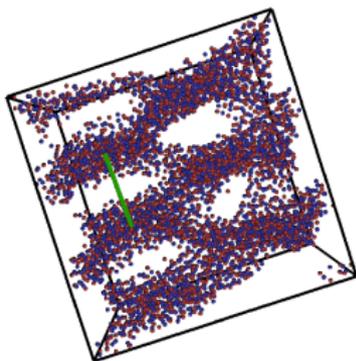


## Trazabilidad del desarrollo de software



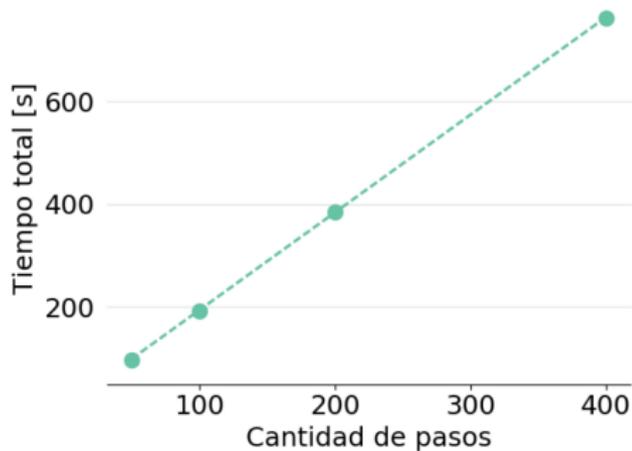
**git**

# Ejemplo: Optimización del código de interacción de moléculas

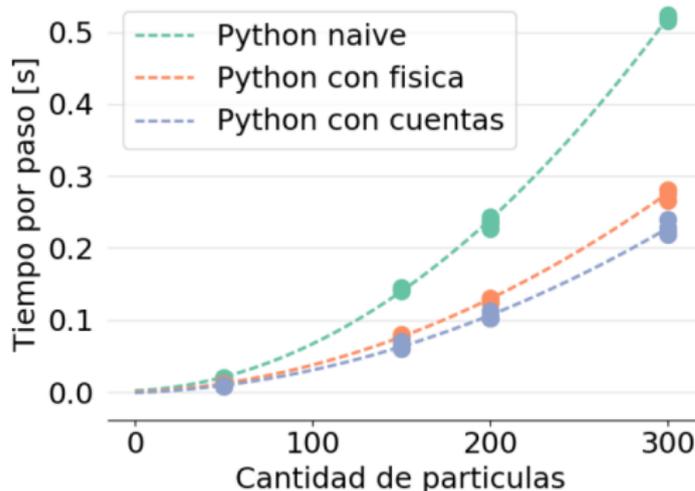




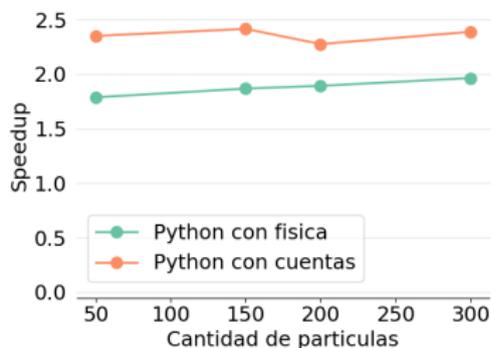
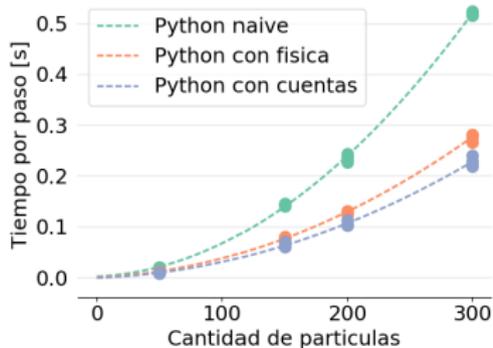
## Python *naive*



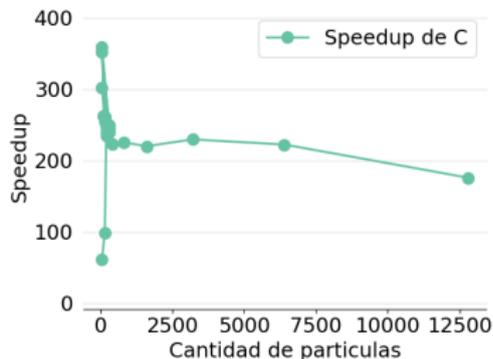
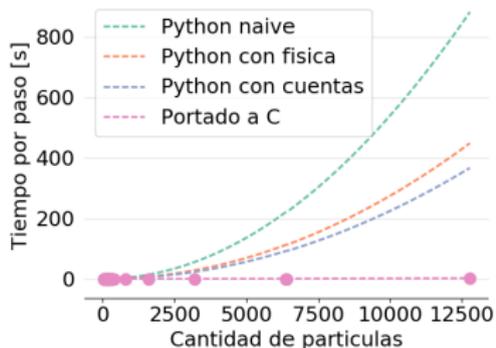
## Python con física y con cuentas



## Python con física y con cuentas

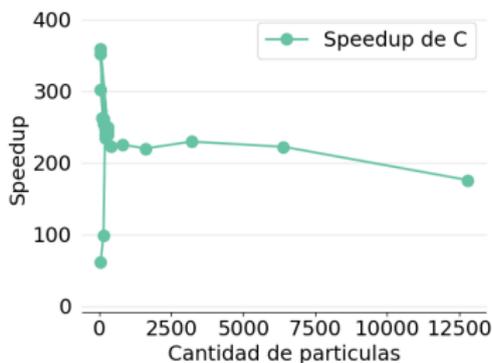
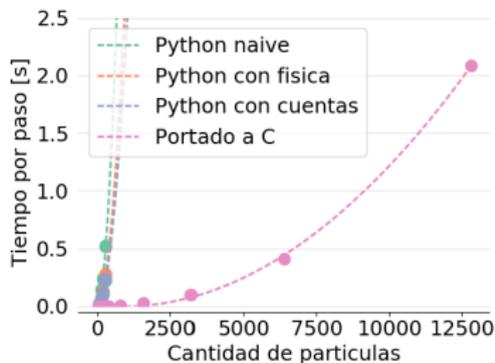


## Python y C

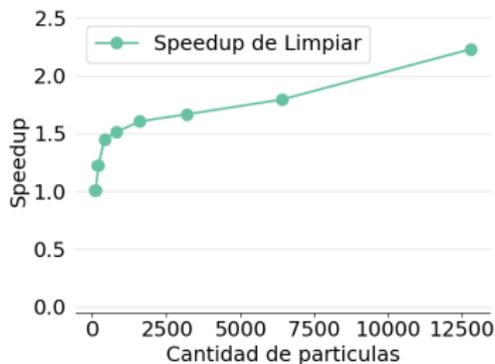
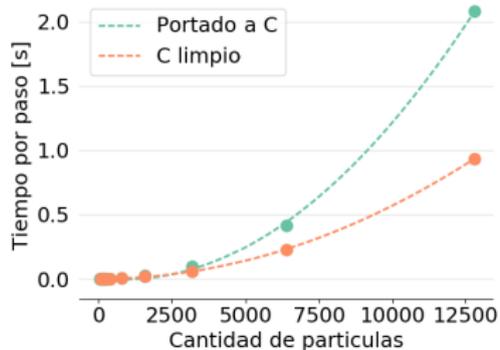




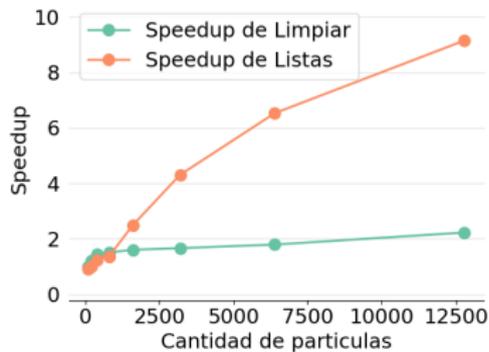
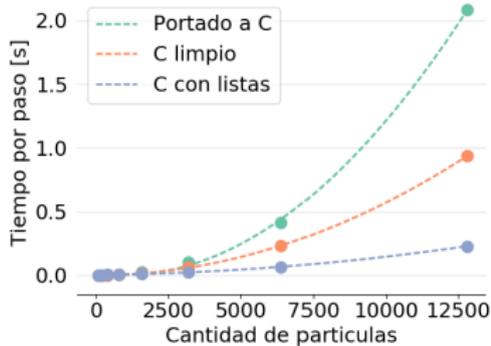
## Python y C



## Python y C (más limpio)

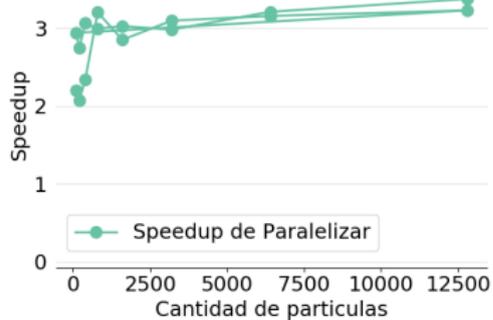
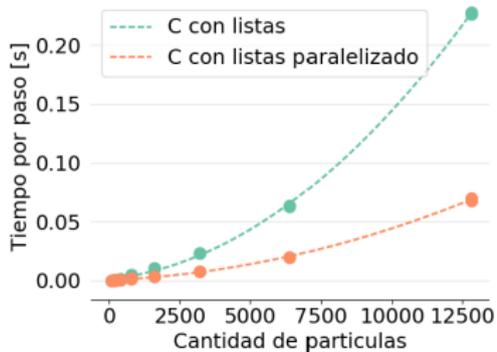


## Python y C (listas)

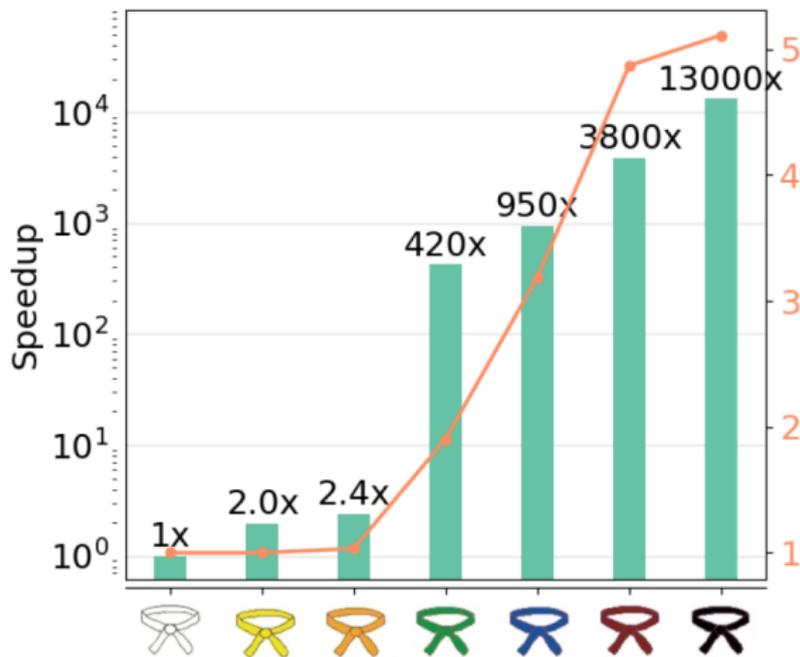


## Con paralelización

R



# Optimización del código de interacción de moléculas



# Optimización del código de interacción de moléculas



# Optimización del código de interacción de moléculas



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