

Università degli Studi di Napoli Federico II
Dipartimento di Matematica e Applicazioni “Renato Caccioppoli”

Nell’ambito di
Tecnologie per il Calcolo Scientifico
Ciclo di lezioni e seminari per gli studenti del Dottorato e dei corsi di laurea
Magistrale (Matematica, Informatica, Mathematical Engineering)

Ciclo di lezioni su PETSc - 1° appuntamento
**PETSc: A Mathematical Library for
engineering problems.**

Oana Marin
Assistant Applied Mathematics Specialist^a

^a*Mathematics and Computer Science Division, Argonne National
Laboratory, IL-USA*

11 Aprile 2019 ore 15 - Aula riunioni I livello

L’Argonne National Laboratory¹ (Chicago, Illinois, USA) è un centro di ricerca multidisciplinare, una delle strutture di eccellenza degli Stati Uniti d’America, e uno dei più importanti centri di ricerca del mondo. Finanziato dall’U.S. Department of Energy (DOE), il suo maggiore partner è l’Università di Chicago², ma lavora in ogni area scientifica, dalla fisica delle particelle, alla scienza dei materiali, dalla biologia, all’informatica e alla matematica computazionale, in collaborazione con le maggiori università, industrie e centri di ricerca del mondo, per essere in grado di affrontare soprattutto problemi troppo grandi per essere risolti da una struttura sola.

A disposizione di tutti i dipartimenti del Laboratorio, l’ANL possiede uno dei supercalcolatori più potenti al mondo, chiamato Mira (peak performance da 10-petaflops, ovvero 10 milioni di miliardi di operazioni floating point al secondo), e sta portando attualmente in produzione una nuova macchina, ancora più potente, chiamata Theta.

Il dipartimento di Mathematics and Computer Science, leader nella computer science mondiale, crea strumenti numerici e tecnologici per la soluzione di problemi sempre più urgenti e sempre più importanti.

Da molti anni all’MCS è stata creata e si evolve continuamente la libreria PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation), un insieme di strutture dati e funzioni, basati sullo standard MPI, per la soluzione parallela (e

¹<https://www.anl.gov/>

²<https://www.uchicago.edu/>

scalabile) di applicazioni scientifiche modellate da PDEs, su architetture parallele eterogenee e di dimensioni variabili. Usata da scienziati in tutto il mondo, PETSc è oggi una delle più importanti librerie scientifiche disponibili, la cui espansione è catalizzatore di interesse da parte della comunità scientifica internazionale.

1 Abstract

The Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc) is a suite of data structures and routines for the scalable (parallel) solution of scientific problems arising from the discretization of PDEs. Mainly, it is a powerful general-purpose infrastructure for the solution of sparse linear and non-linear systems. Due to its solid mathematical grounding, careful software design, and most importantly, evolution resulting from the usage of many users on various application areas, PETSc has had a major impact throughout the scientific and engineering computing community. The talk will give an overview of the PETSc library, and demonstrate its uses in algorithmic research, numerical production simulation and parallel performance evaluation, using applications as examples. Especially, it will illustrate how to define and use the main needed objects under the PETSc environment, highlighting their potential. At the end of the talk, we will discuss the ongoing work to drive PETSc to the near or more distant future.

1.1 Speaker Short Bio

Dr. Oana Marin is an Applied Mathematician at Argonne National Laboratory, currently affiliated with the PETSc group and previously on the team of the computational fluid dynamics code Nek5000³. She obtained her PhD in Numerical Analysis from Royal Institute of Technology in Sweden in boundary integral methods, and went to work on scalable solvers for computational fluid dynamics. Her main interests are PDE-constrained optimization and improving solvers for efficiency.

2 A seguire

In tempi successivi, con data da destinarsi, la Dott.ssa Valeria Mele, ricercatore del Dipartimento di Matematica e Applicazioni “R. Caccioppoli” dell’Università di Napoli Federico II, completerà il ciclo di lezioni con due incontri di introduzione all’utilizzo della libreria PETSc. Nei due incontri si mostreranno le funzionalità e la gestione degli oggetti essenziali della libreria per la risoluzione di sistemi lineari e non lineari di PDE, anche ricostruendo la scrittura e l’esecuzione di un semplice codice che utilizzi almeno uno dei solutori introdotti. Tali lezioni intendono essere utili prevalentemente a chi non ha ancora mai utilizzato la libreria PETSc e a chi ha poca familiarità con essa ma potrebbe invece avvalersene per la propria ricerca e per la costruzione di software scientifico efficiente, affid-

³<https://nek5000.mcs.anl.gov/>

abile, flessibile e soprattutto portabile.

Questo ciclo di lezioni vuole essere il primo evento di una serie di lezioni e seminari sul tema *Tecnologie per il Calcolo Scientifico* che verranno proposti a tutti gli interessati e soprattutto agli studenti del Dottorato e delle lauree Magistrali (Matematica, Informatica, Mathematical Engineering,...).

Info: Dott. Valeria Mele (valeria.mele@unina.it, 081675625)
Prof. Giuliano Laccetti (giuliano.laccetti@unina.it, 081675619)
Prof. Marco Lapegna (marco.lapegna@unina.it, 081675623)

References

- [1] PETSc Web Pages <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [2] B. Smith, *The portable extensible toolkit for scientific computing*, 2013, Lectures at the The Argonne Training Program on Extreme-Scale Computing, August 2013.