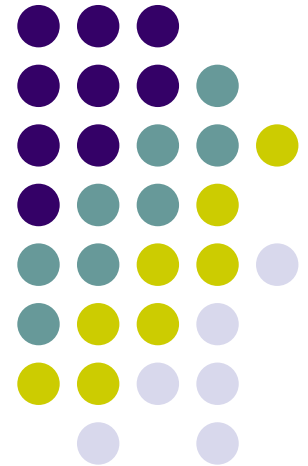


ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ: Μια ενδιαφέρουσα σταδιοδρομία

N. Μισυρλής

(e-mail: nmis@di.uoa.gr)

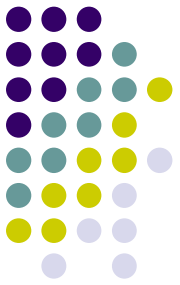
Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών
Πανεπιστήμιο Αθηνών



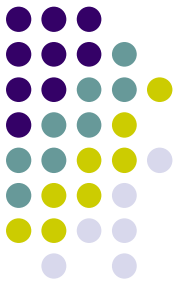
Parallel Scientific Computing Laboratory (PSCL)
<http://parallel.di.uoa.gr/PSCL>

Περιεχόμενα

- Τι είναι Επιστημονικοί Υπολογισμοί;
- Τι πρέπει να ξέρω;
- Πού μπορώ να βρω δουλειά;



Τι είναι Επιστημονικοί Υπολογισμοί;



Περί τα μέσα του 50.....

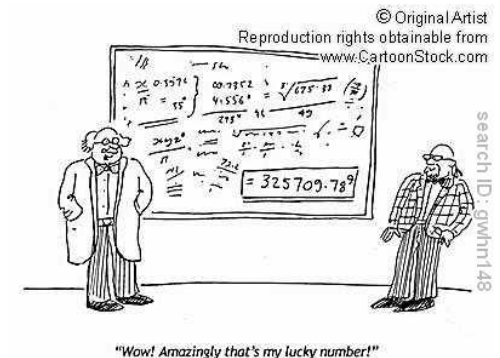
Συζήτηση μεταξύ ενός Μηχανικού κατασκευής αεροπλάνου και ενός Επιστήμονα Φυσικού.

Μηχανικός: Αν περιμέναμε να πάρουμε τα αποτελέσματα της Φυσικής, δεν θα πετούσε αεροπλάνο σήμερα.

Φυσικός: Έχεις δίκιο, είναι πολλά και δύσκολα τα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε στην κατασκευή του αεροπλάνου.

Τι εννοεί ο Μηχανικός;

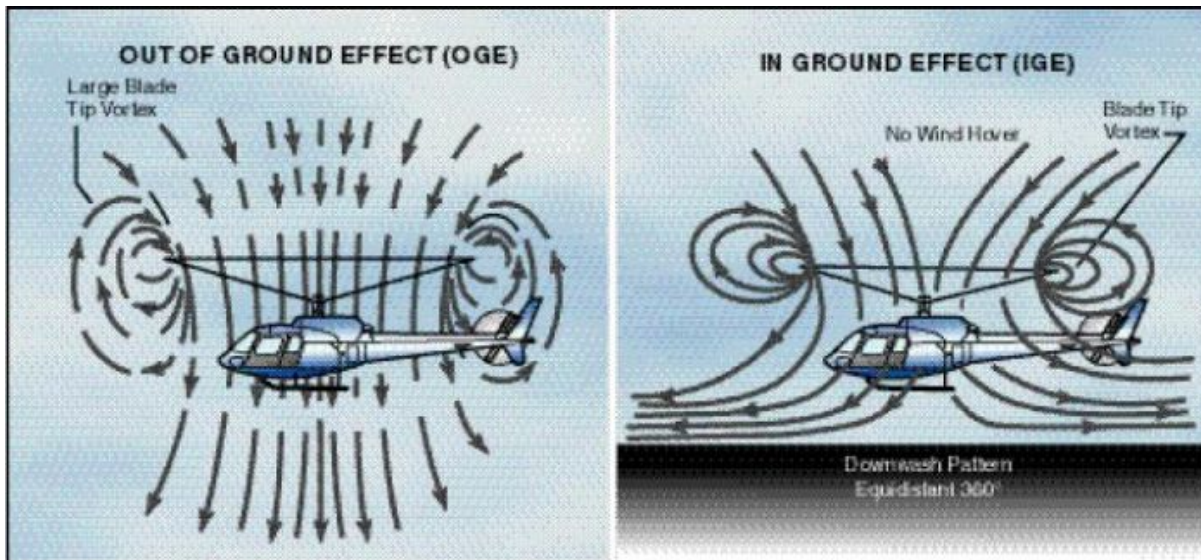
Γιατί ο Φυσικός συμφωνεί;



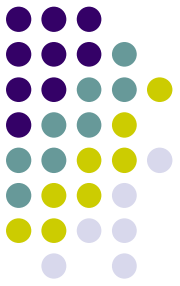
Απαντήσεις

Ο Μηχανικός

- Ο Μηχανικός κατασκεύασε το αεροπλάνο πειραματιζόμενος στο εργαστήριο.
- Εφάρμοσε απλές αρχές της Φυσικής αλλά περισσότερο βασίστηκε στο πείραμα.
- Τοποθέτησε το αεροπλάνο σε μια σήραγγα και δημιούργησε ρεύματα αέρος για να μελετήσει την συμπεριφορά του αεροπλάνου.



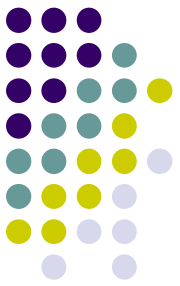
Απαντήσεις



Ο Φυσικός

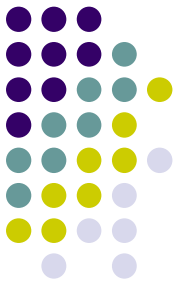
- Προσπάθησε να μελετήσει με βάση την επιστήμη της Φυσικής την συμπεριφορά του αεροπλάνου.
- Κατέληξε σε κάποιες πολύπλοκες εξισώσεις.
- Άλλες τις έλυσε και άλλες όχι. Αυτές που έλυσε, διαπίστωσε ότι η λύση τους δεν ανταποκρινόταν στην πράξη.

Τα προβλήματα της δεκαετίας του 50



- Χρονοβόρα και δαπανηρά πειράματα.
- Πολύ κακές προσεγγίσεις τιμών για διάφορα μεγέθη όπως των ασκούμενων δυνάμεων πίεσης στο αεροπλάνο.
- Η θεωρία της Φυσικής δεν μπορούσε να εφαρμοστεί, διότι δεν παρείχαν ικανοποιητικές λύσεις τα Μαθηματικά.

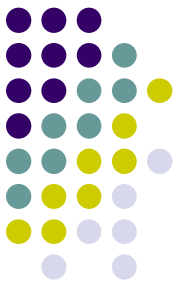
Σήμερα



- Τα πειράματα στο εργαστήριο έχουν μειωθεί στο ελάχιστο.
- Οι μετρήσεις των μεγεθών γίνονται με μεγάλη ακρίβεια.
- Αποτελεσματική κατασκευή του αεροπλάνου.

Ο λόγος που οδήγησε στα ανωτέρω επιτεύγματα είναι

«Η κατασκευή ενός αεροπλάνου γίνεται με προσομοίωση σε υπολογιστή»

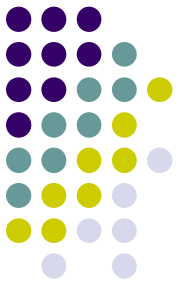


Τι σημαίνει προσομοίωση με υπολογιστή;

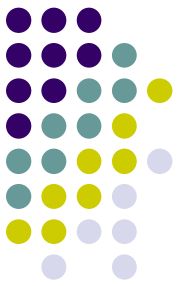
- Δεδομένης της αριθμητικής λύσης ενός επιστημονικού προβλήματος.
- Παράσταση της λύσης με χρήση λογισμικού γραφικών.

Ποιά είναι τα βήματα για την επίλυση ενός επιστημονικού προβλήματος;

Βήματα

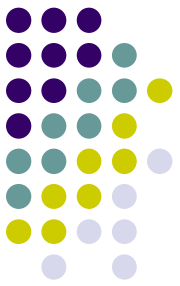


1. Μοντελοποίηση του επιστημονικού προβλήματος.
2. Επίλυση των Εξισώσεων του μοντέλου.
3. Γραφική Αναπαράσταση των λύσεων.



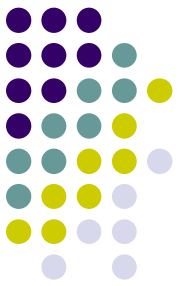
1. Μοντελοποίηση του Προβλήματος

- Ένα πρόβλημα το οποίο είναι απαλλαγμένο από περιττές (μη ουσιαστικές όσο αφορά τη Φυσική) παραμέτρους.
- Περιγράφεται η συμπεριφορά του μοντέλου με ένα σύστημα εξισώσεων.
- Οι εξισώσεις δημιουργούνται από την εφαρμογή των αρχών της Φυσικής για το εν λόγω μοντέλο.



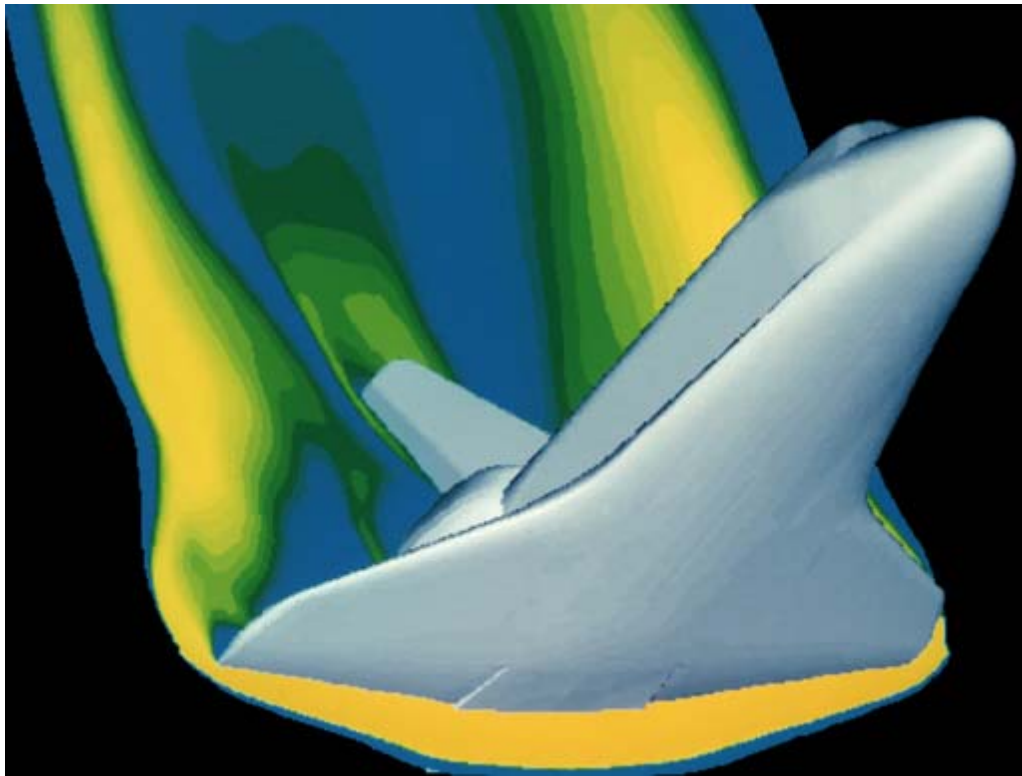
2. Επίλυση των Εξισώσεων του μοντέλου

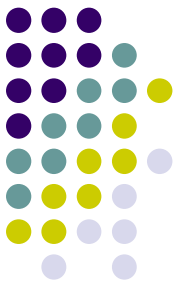
- Χρησιμοποιούνται αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση των εξισώσεων.
- Οι αριθμητικές μέθοδοι αποτελούνται από πράξεις $+$, $-$, $/$, $*$ μόνον.
- Μπορούν να υλοποιηθούν με την χρήση μιας γλώσσας προγραμματισμού.



3. Γραφική Αναπαράσταση των λύσεων

Μετατροπή των αριθμών σε σχήματα και εικόνες. Για παράδειγμα, κίνηση αεροπλάνου εντός ενός ρεύματος αέρος.





Άλλα όμοια προβλήματα

- Πρόγνωση καιρού.
- Πρόγνωση κλιματικών συνθηκών.
- Πρόγνωση Ωκεανού (συμπεριφορά τσουνάμι)!
- Πρόγνωση αέριας ρύπανσης.
- Πρόγνωση συμπεριφοράς χρηματιστηρίου!
- Πρόγνωση σεισμών (σε αρχικό στάδιο).

Η λίστα είναι μεγάλη.....

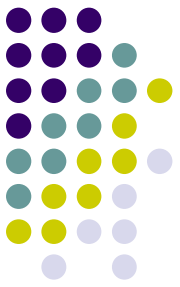
Πρόγνωση καιρού



- Η αριθμητική πρόγνωση καιρού χρησιμοποιεί μαθηματικά μοντέλα της ατμόσφαιρας και του ωκεανού
- Πρώτες προσπάθειες έγιναν το 1920
- Το 1950, εποχή της προσομοίωσης με υπολογιστές, είχαμε ρεαλιστικά αριθμητικά αποτελέσματα πρόγνωσης καιρού.
- Ένας αριθμός τοπικών και καθολικών αριθμητικών μοντέλων χρησιμοποιούνται για πρόγνωση
- Χρησιμοποιούν για είσοδο, τις τρέχουσες καιρικές παρατηρήσεις, οι οποίες προέρχονταν από ραδιοβολίδες ή από δορυφόρους καιρού.

Εργαστήριο Παράλληλων Επιστημονικών Υπολογισμών

Τμήμα Πληροφορικής και Τηλ/νιών ΕΚΠΑ



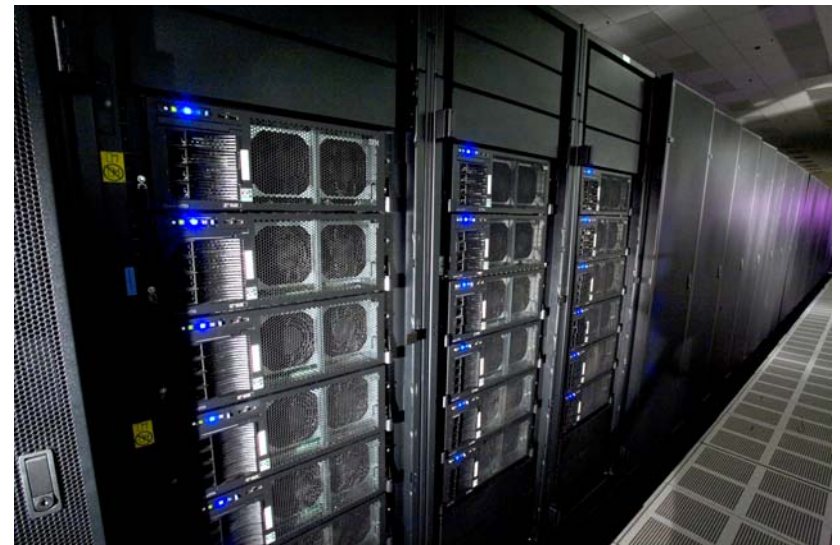
- **Αντικείμενο**

Ανάπτυξη παράλληλου επιστημονικού λογισμικού για την προσομοίωση πολύπλοκων φυσικών φαινομένων προκειμένου να μελετηθεί η συμπεριφορά τους

- **Εξοπλισμός**

HP-Superdome 64 processors

HP-V2600 32 Processors



Εργαστήριο Παράλληλων Επιστημονικών

Υπολογισμών

Τμήμα Πληροφορικής και Τηλ/νιών ΕΚΠΑ



- **Projects**

- **Το Παράλληλο Μοντέλο ΣΚΙΡΟΝ**

Αριθμητικό μοντέλο τοπικής πρόγνωσης καιρού. Σε επιχειρησιακή λειτουργία στην ΕΜΥ.

- **Το Παράλληλο Μοντέλο ΡΟΜ**

Αριθμητικό μοντέλο προσομοίωσης ωκεανού. Σε επιχειρησιακή λειτουργία στο ΕΛΚΕΘΑ.

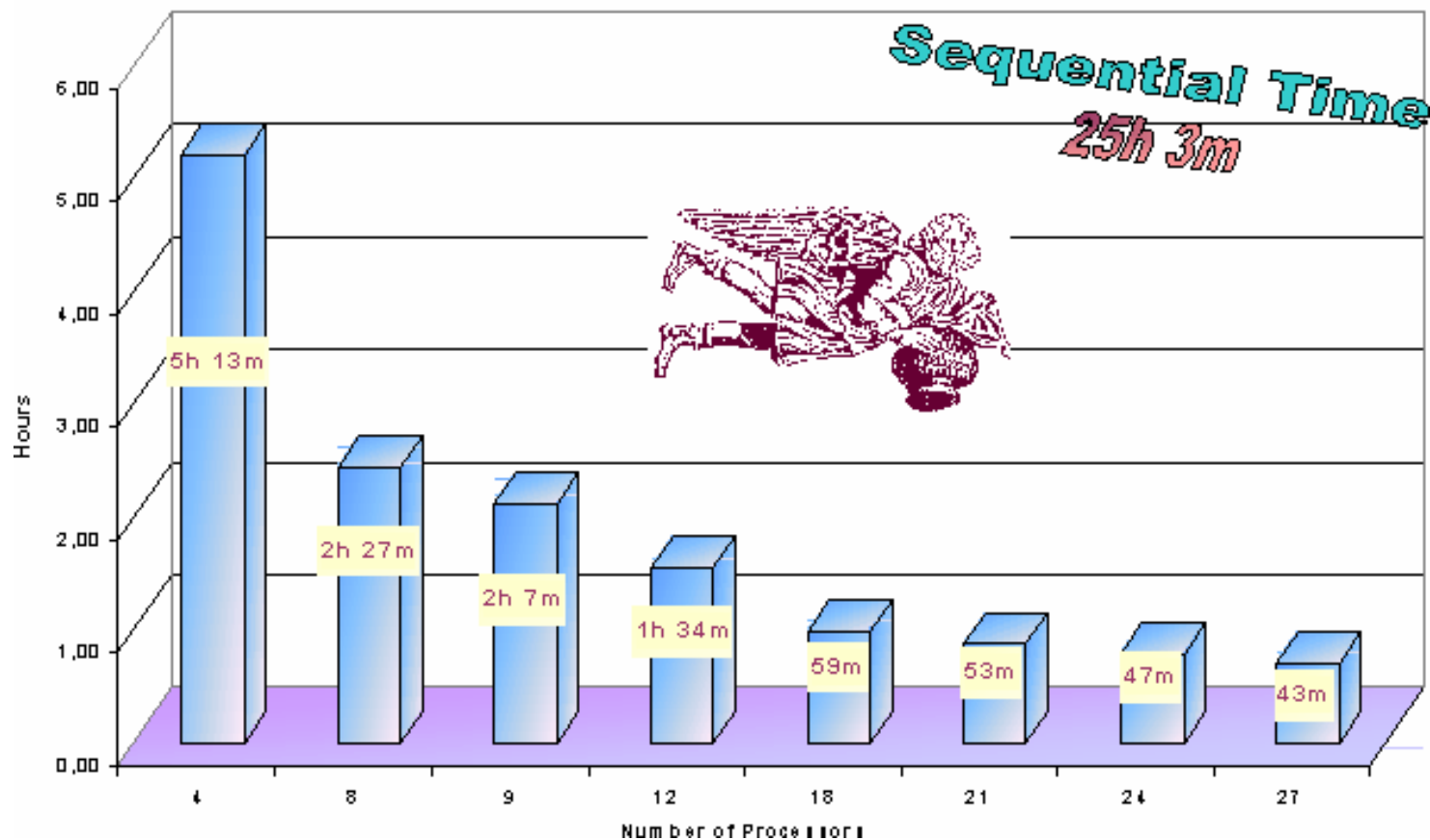
- **Εξισορρόπηση φορτίου : Μια εφαρμογή σε αριθμητικά μοντέλα πρόγνωσης καιρού (ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ I)**

The Weather Forecasting System SKIRON



**M
P
I**

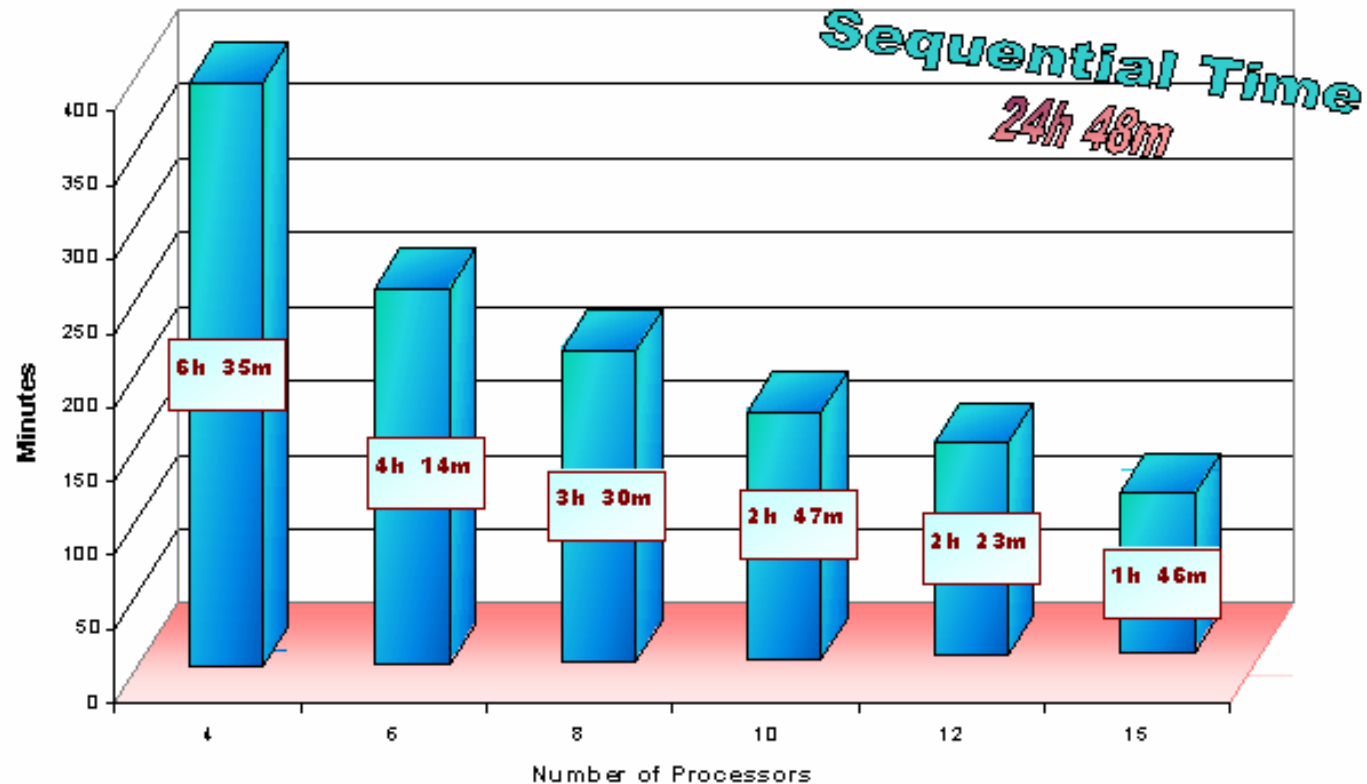
<i>machine</i>	<i>SPP-2000</i>
optimization level	02
grid spacing	0.125
hours	12
# of grid points	241 x 321 x 32
# of iterations	960



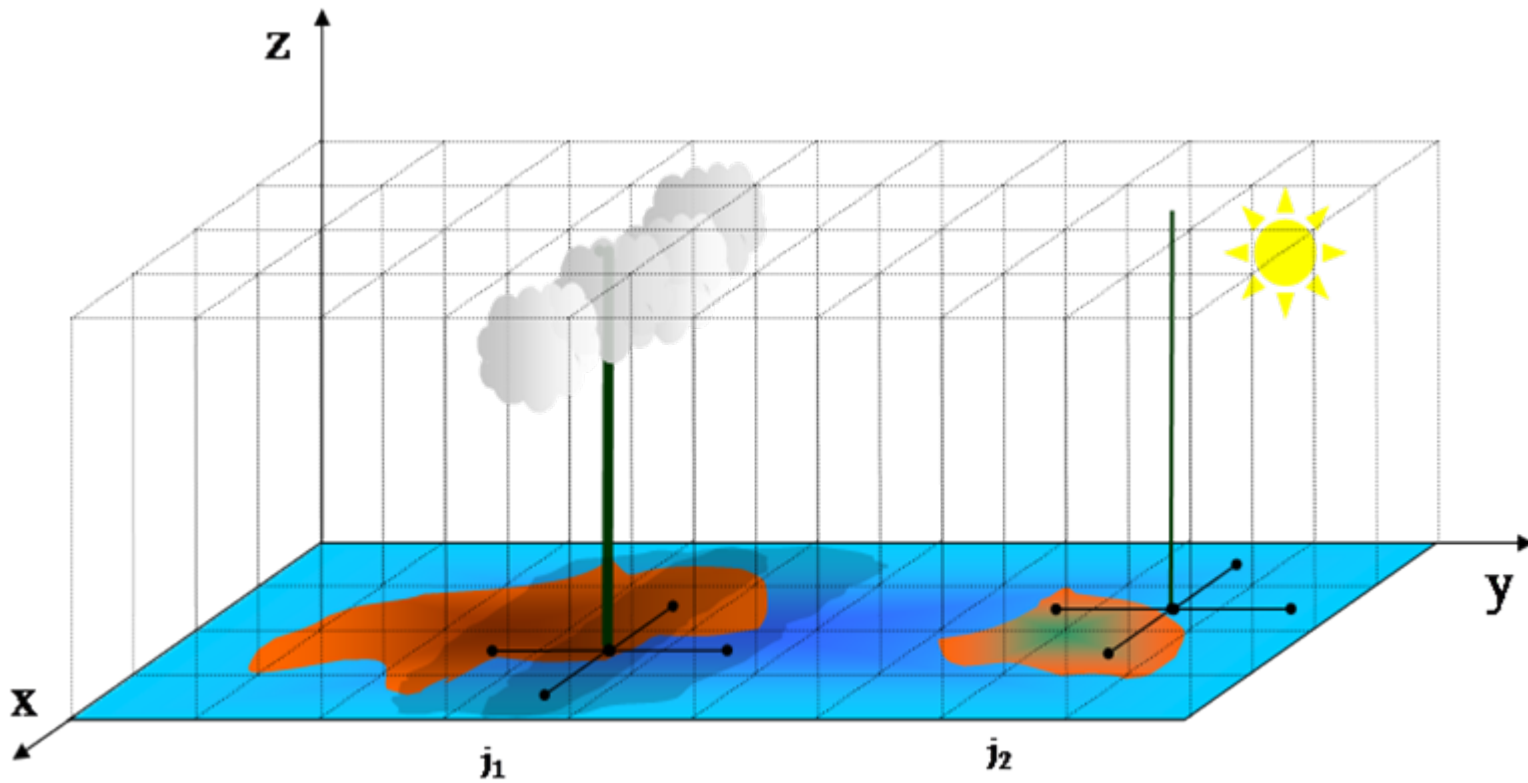
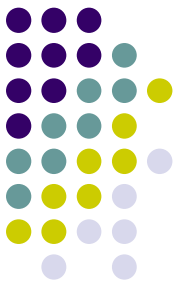
Parallelizing the Princeton Ocean Model

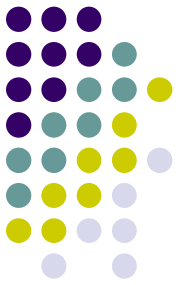
**M
P
I**

<i>ma chine</i>	<i>Spp-1600</i>
optimization level	02
grid spacing	0.125
days	30
# of grid points	360 x 120 x 30
# of iterations	1440



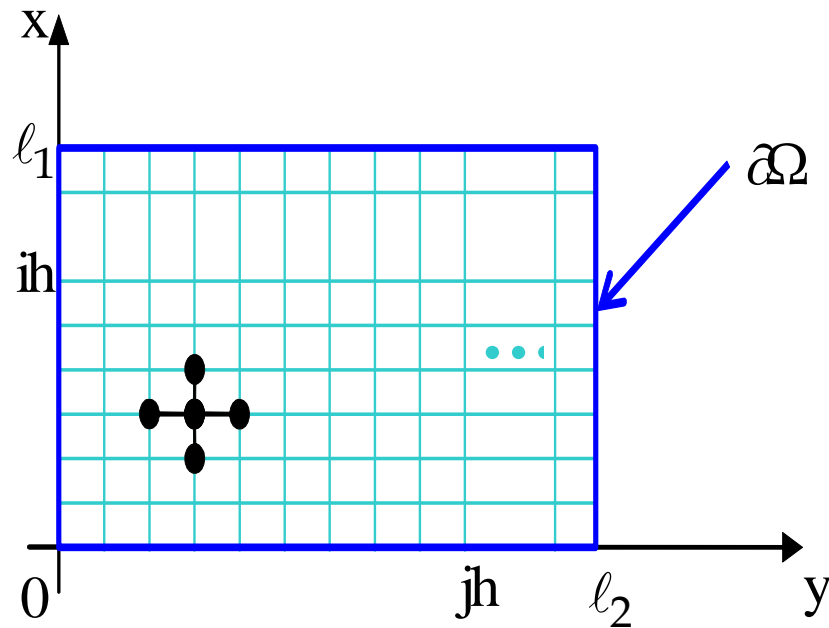
Το Πρόβλημα



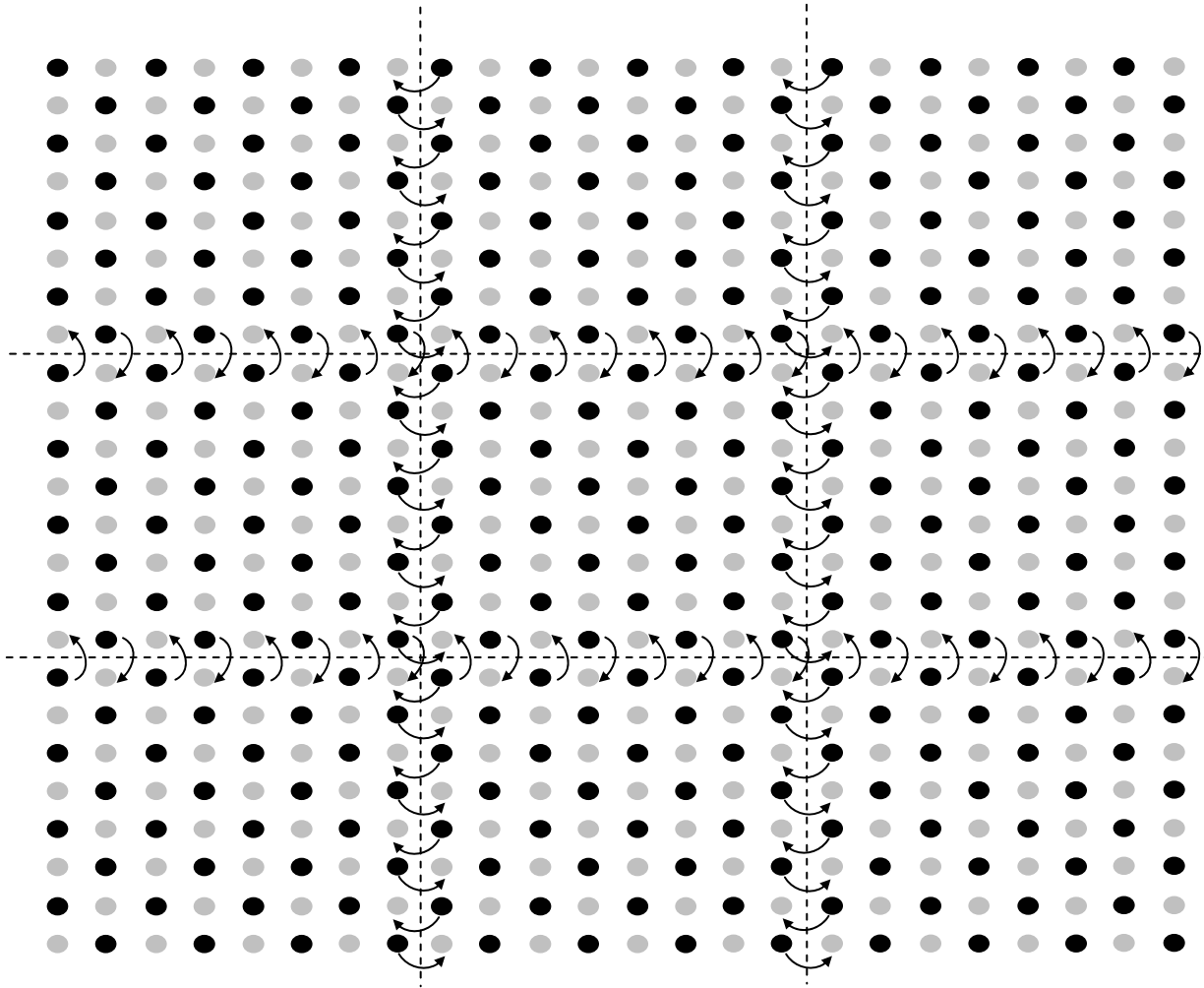
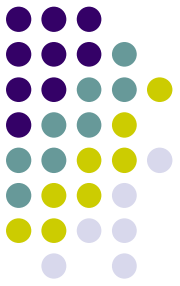


Αριθμητική επίλυση

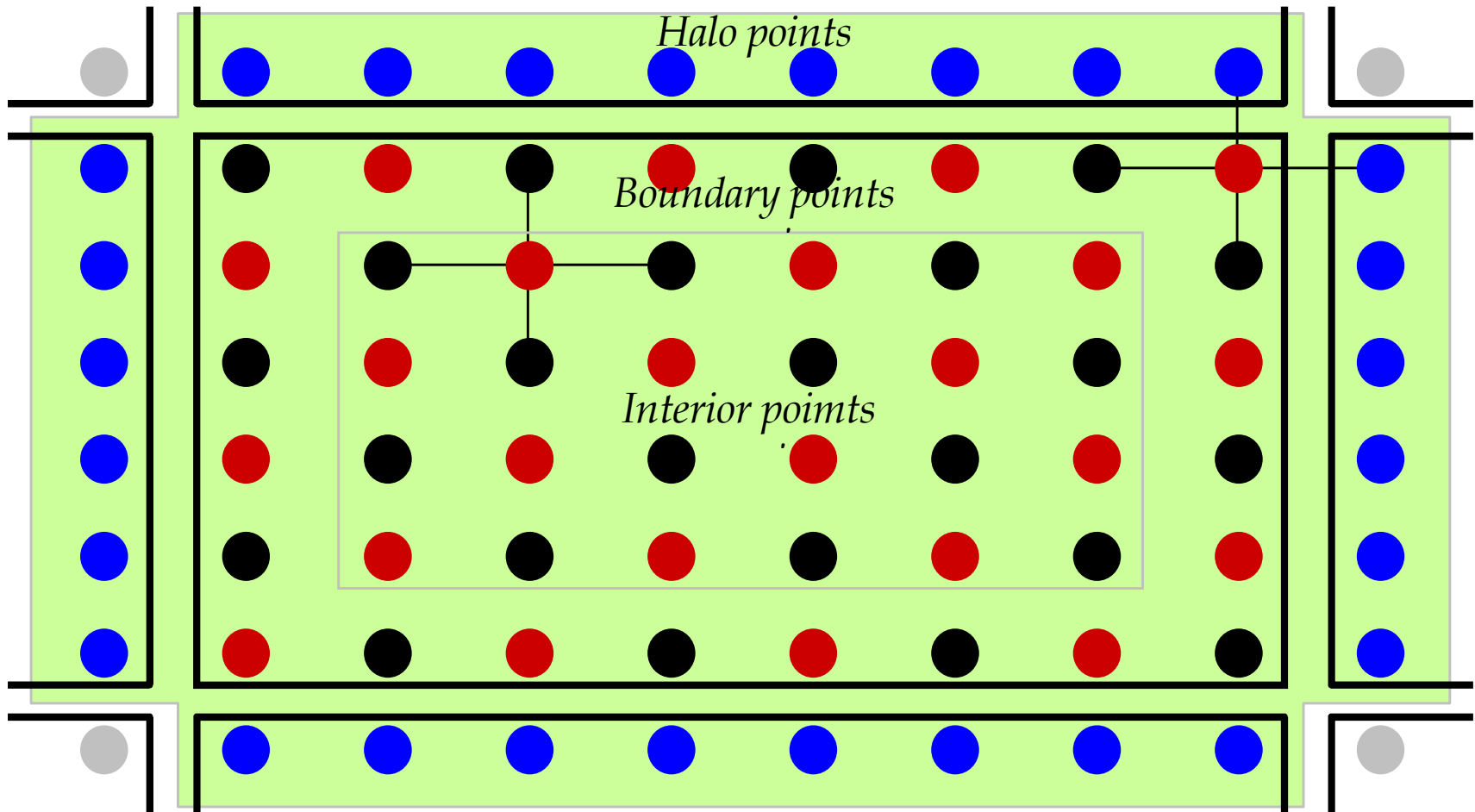
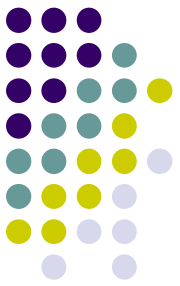
$$u_{ij} = \ell_{ij}u_{i-1,j} + r_{ij}u_{i+1,j} + t_{ij}u_{i,j+1} + b_{ij}u_{i,j-1} \quad (2)$$
$$i = 1, 2, \dots, N \quad j = 1, 2, \dots, N.$$



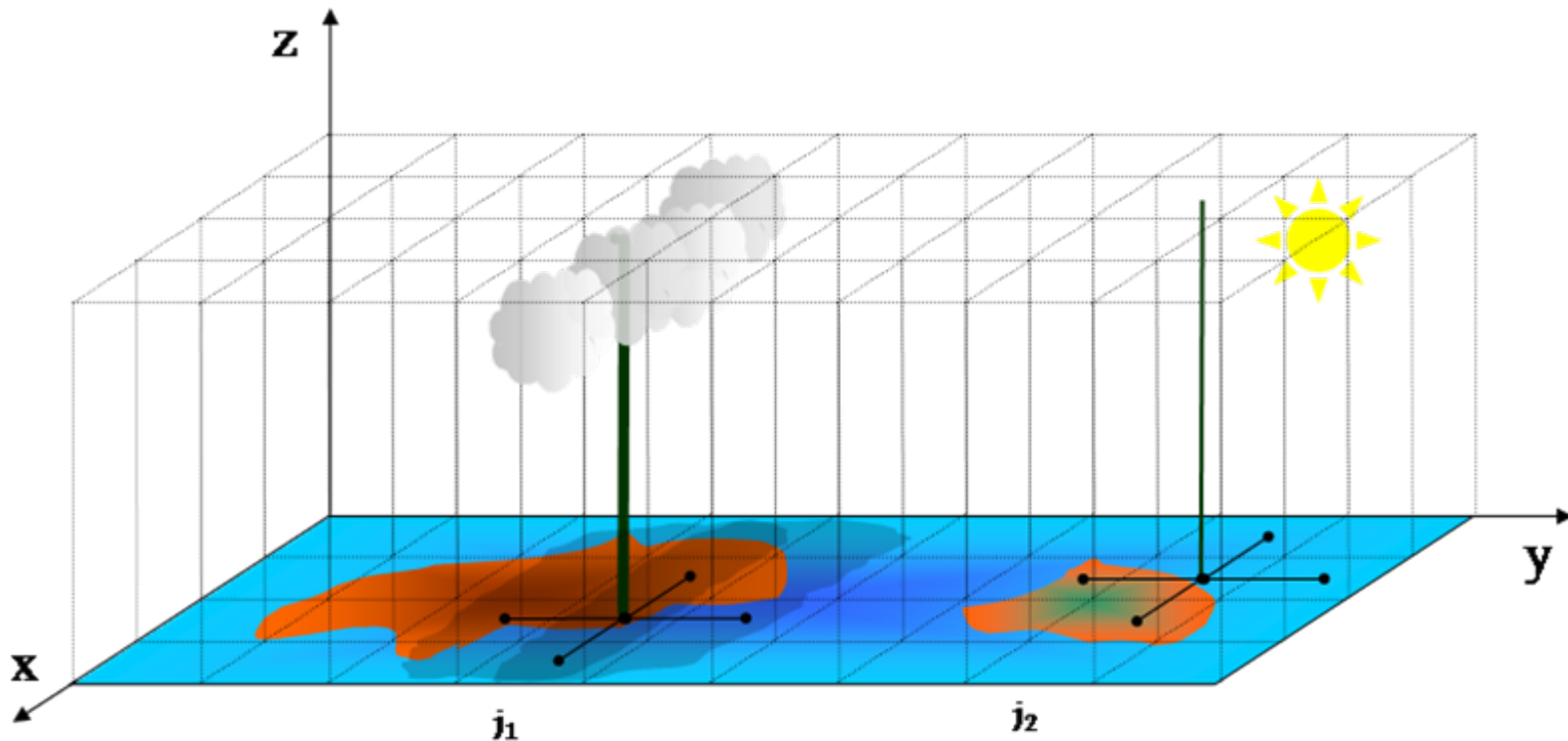
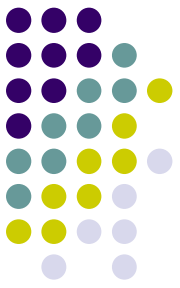
Παράλληλη Υλοποίηση



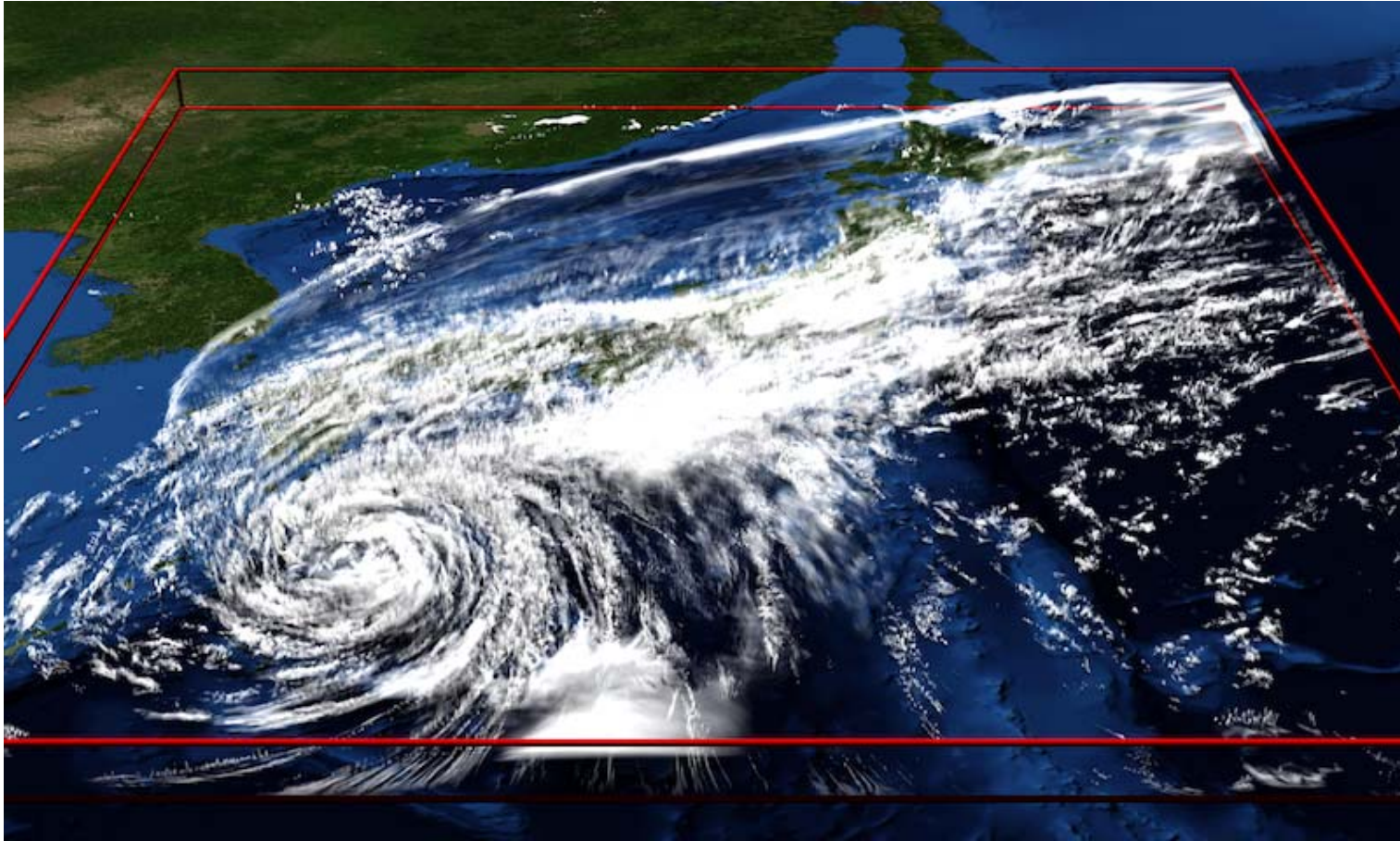
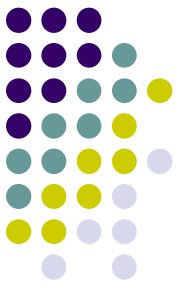
ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑ



Το Πρόβλημα Εξισορρόπησης φορτίου



Δημιουργία ανεμοστρόβιλου



Καταιγίδα σκόνης

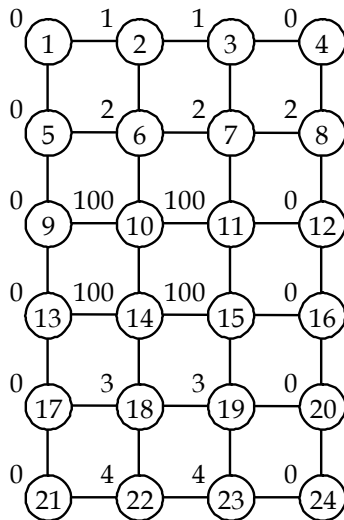


Η μέθοδος της Διάχυσης (Diffusion)

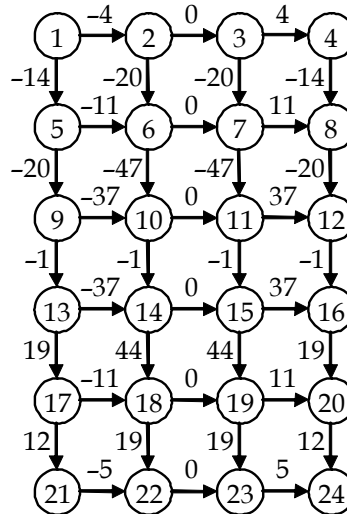


$$u_i^{(n+1)} = u_i^{(n)} + \sum_{j \in \Lambda(i)} \tau_{ij} (u_j^{(n)} - u_i^{(n)})$$

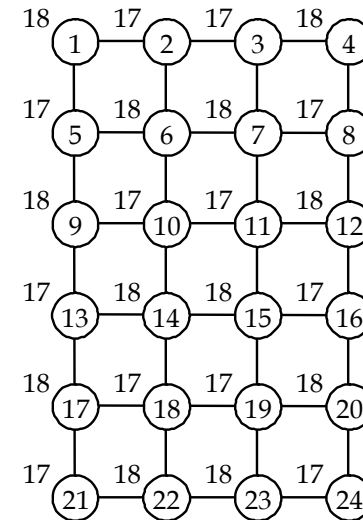
*Initial Load
(a)*

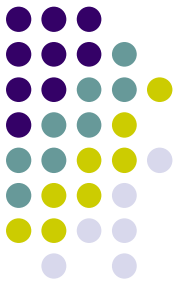


*Load Transfer
(β)*



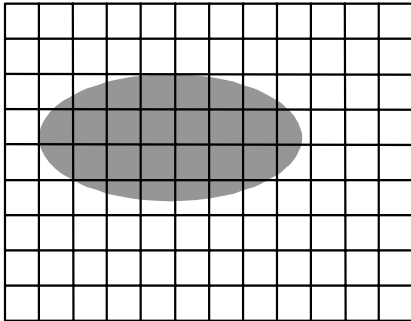
*Load Balanced
(γ)*



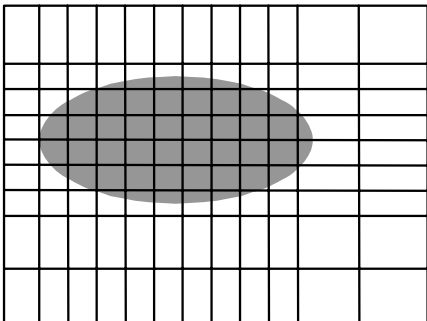


Διαμερισμός Χωρίου

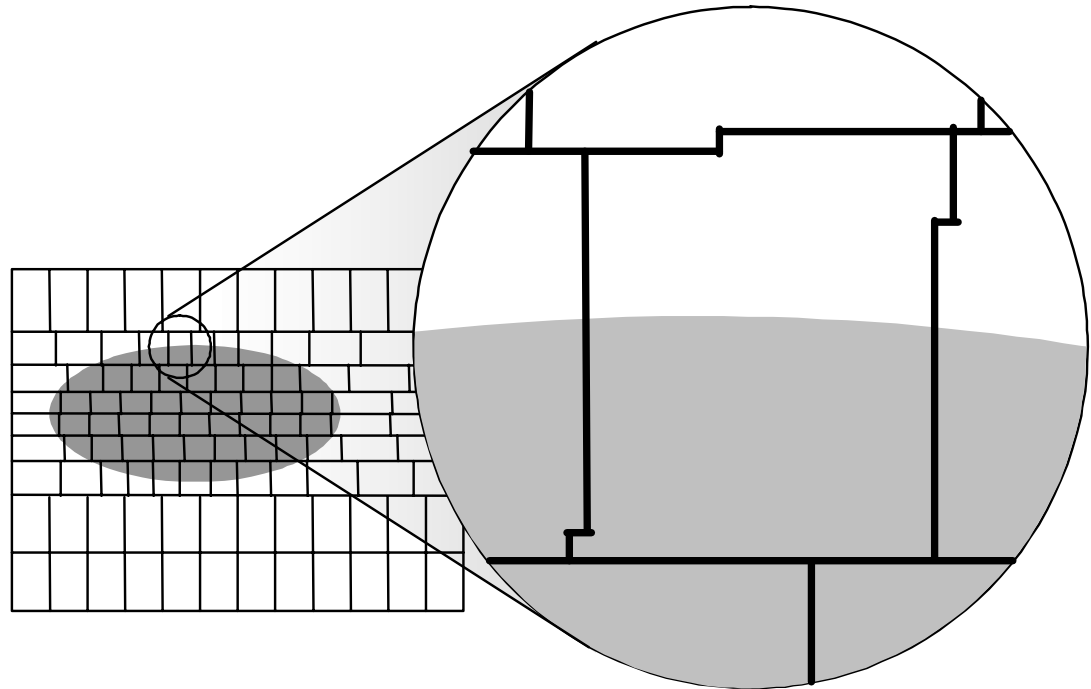
Initial Decomposition



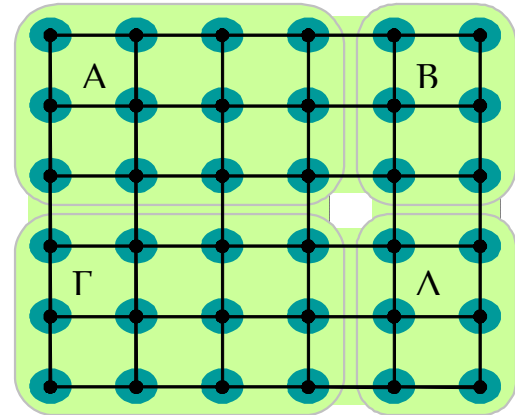
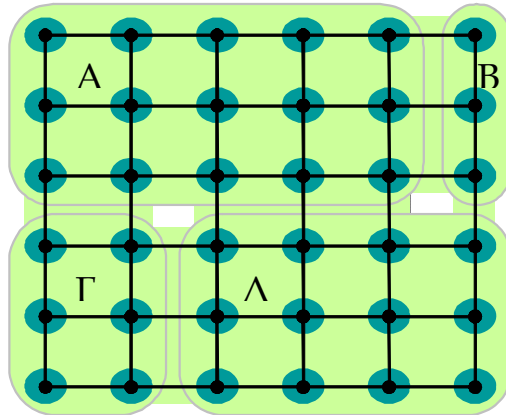
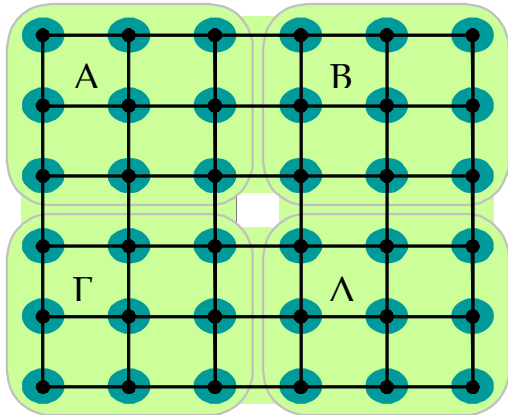
Nesting

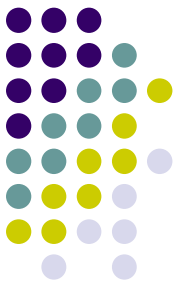


Adjusted Nesting

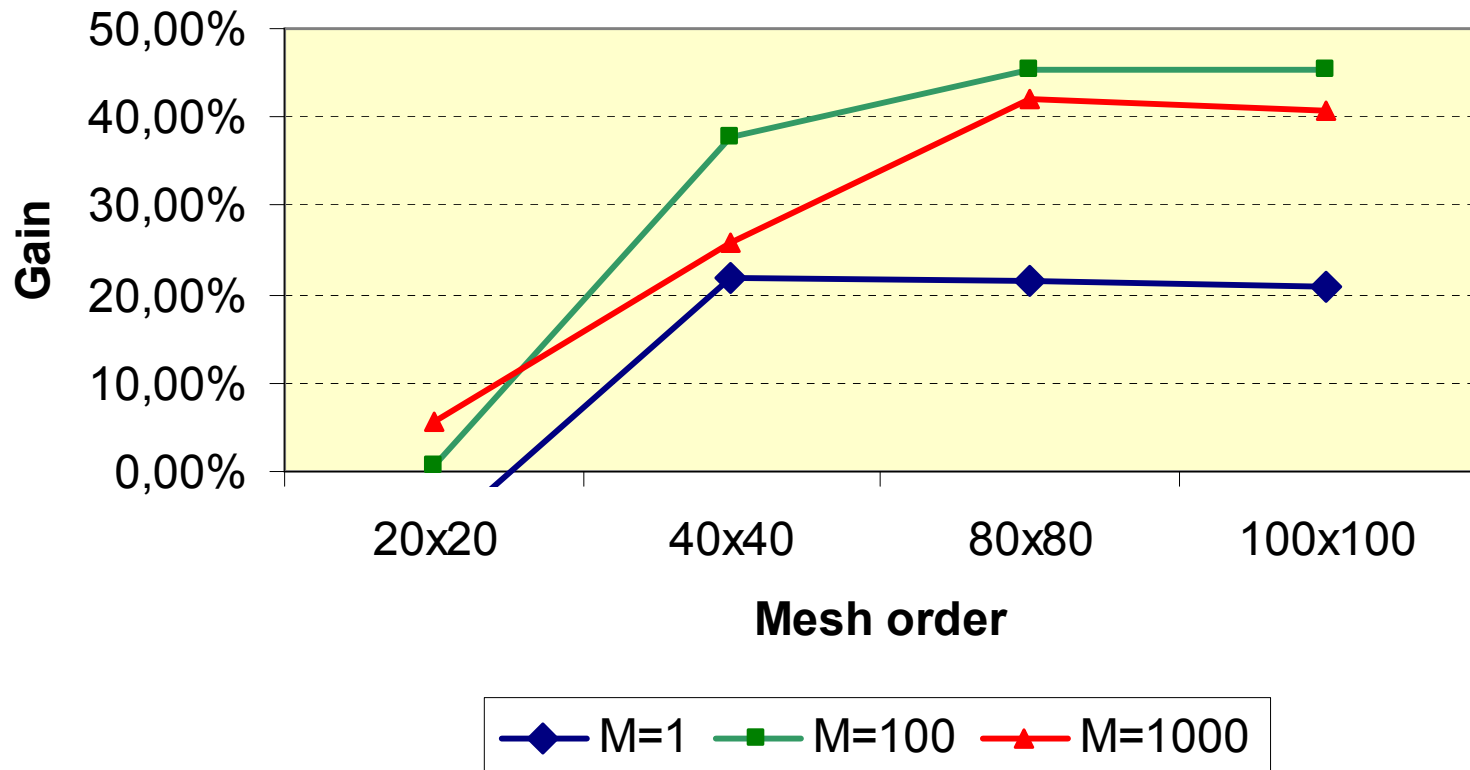


Μεταφορά φορτίου

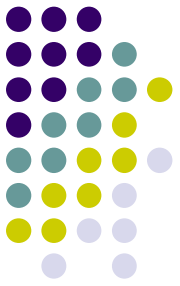




Improvement with 44 processors

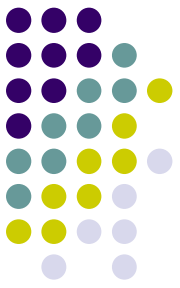


Ιστοσελίδα ερευνητικής ομάδας Μετεωρολογίας, Τμήμα Φυσικής, ΕΚΠΑ



<http://forecast.uoa.gr/>

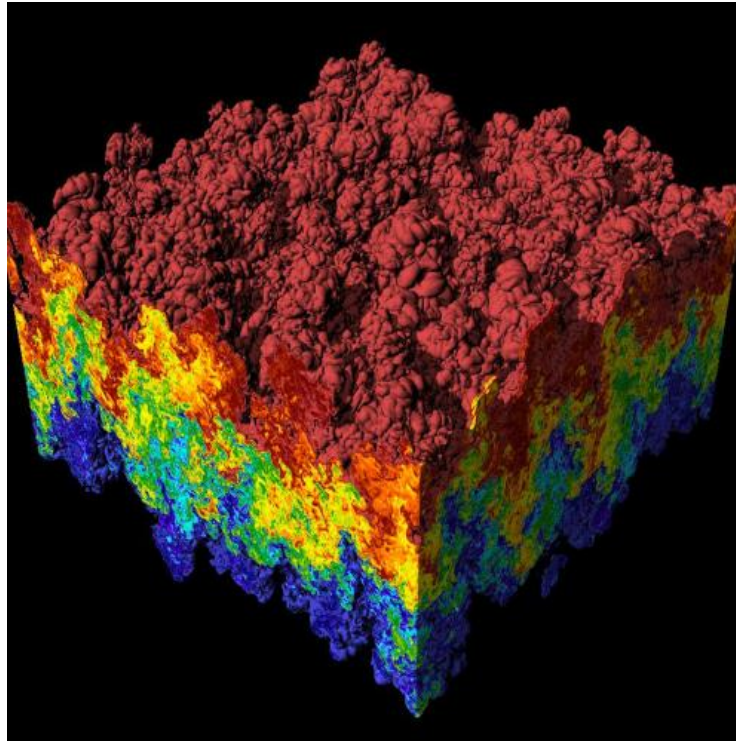
Περιοχές με Υπολογιστικά Προβλήματα



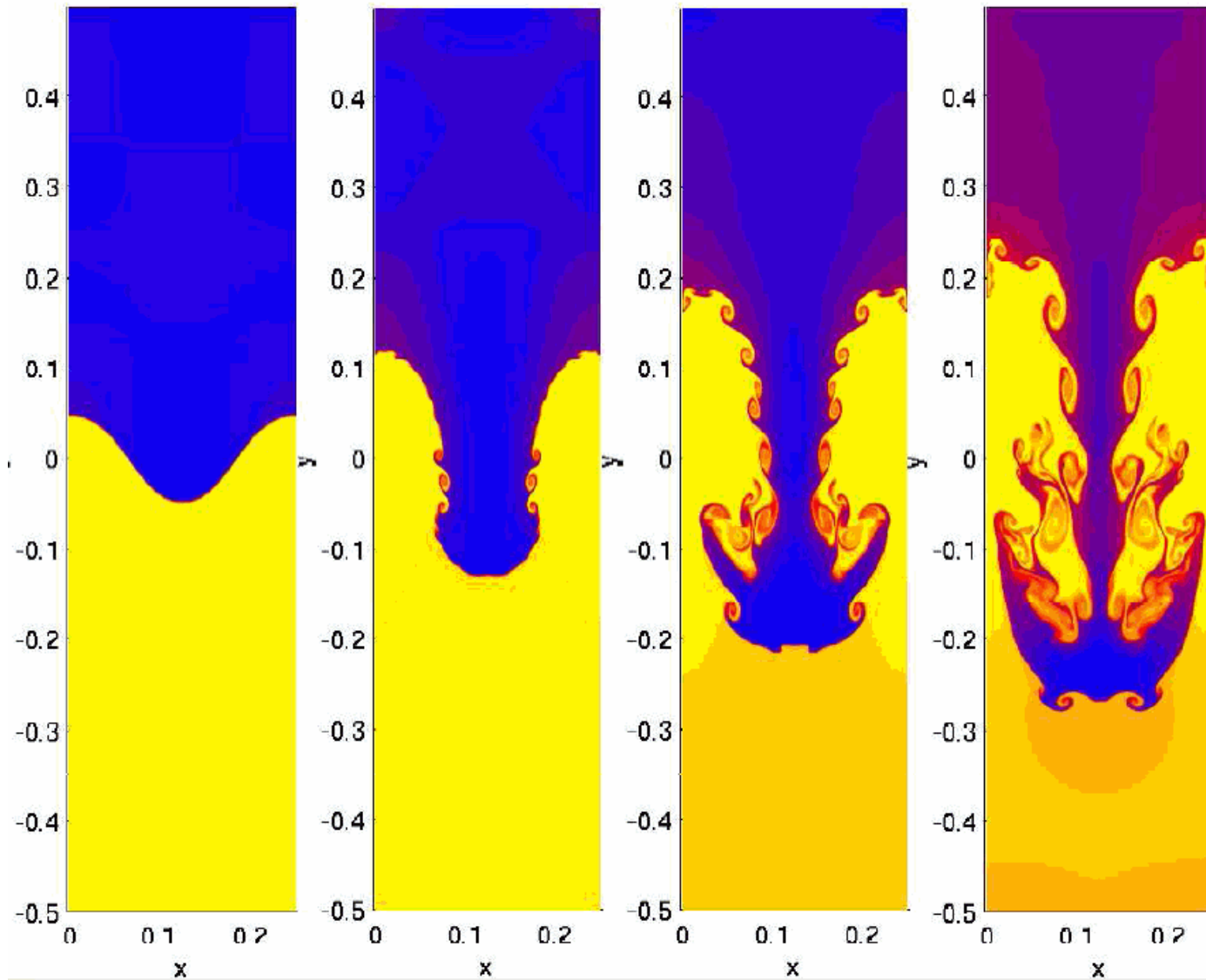
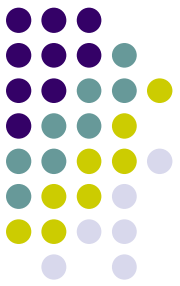
- Υπολογιστική Φυσική
 - Υπολογιστική Χημεία
 - Υπολογιστική Βιολογία
 - Υπολογιστική Γεωλογία
 - Υπολογιστικά Οικονομικά
-
- Για τον λόγο αυτό δημιουργήθηκε η περιοχή
 - Επιστημονικοί Υπολογισμοί (Scientific Computing)
 - Υπολογιστική Επιστήμη (Computational Science)

Υπολογιστική Φυσική

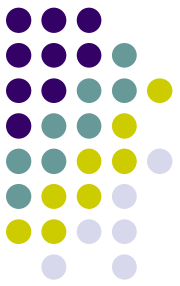
- Κλάδος Μηχανικής των ρευστών
- Χρήση αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων Δυναμικής των Ρευστών
- Προσομοίωση της αλληλεπίδρασης υγρών και αερίων



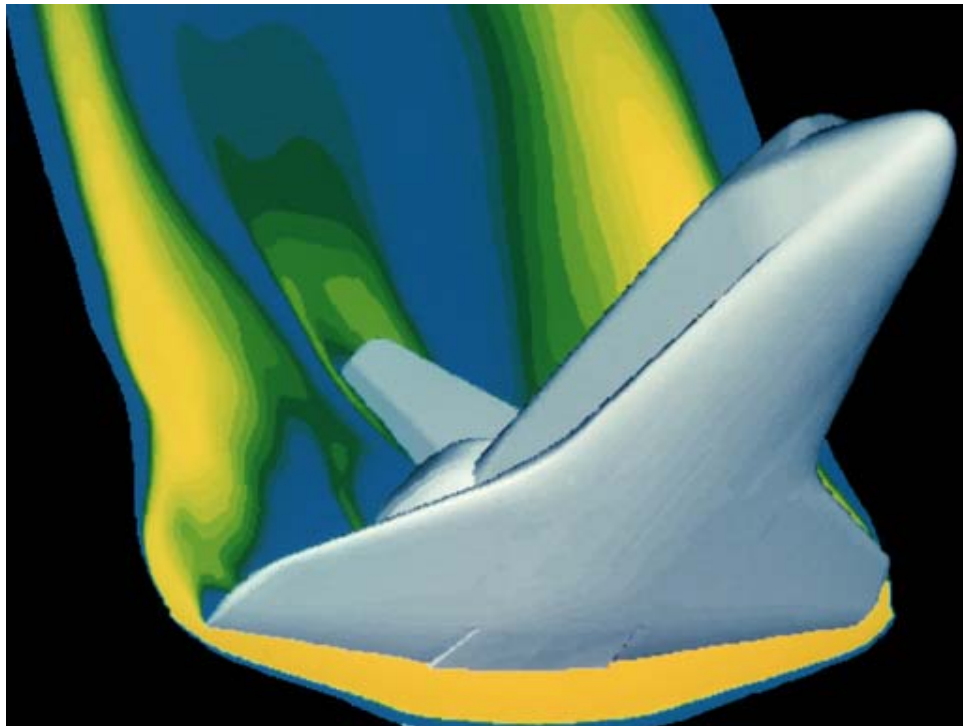
Αλληλεπίδραση υγρών. Το βαρύτερο πάνω ελαφρύτερο κάτω



Προσομοίωση τροχιάς διαστημοπλοίου κατά την είσοδο στην ατμόσφαιρα



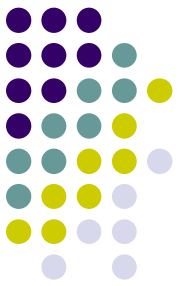
- Επίτευξη καλύτερων αποτελεσμάτων με υπερ-υπολογιστές
- Αυξανόμενη έρευνα από την οποία προκύπτει λογισμικό που βελτιώνει την ακρίβεια και την ταχύτητα σύνθετων σεναρίων προσομοίωσης





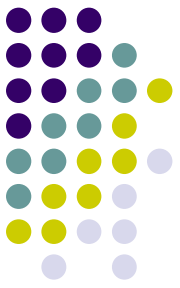
Επιστημονικοί Υπολογισμοί (ΕΥ)

- Είναι η περιοχή που μελετά την αριθμητική επίλυση επιστημονικών προβλημάτων (ΕΠ).
- Η Αριθμητική Ανάλυση βρίσκεται στον πυρήνα της περιοχής των ΕΥ. Είναι τα Μαθηματικά των ΕΥ.
- Η επεξεργασία μεγάλης κλίμακας υπολογισμών που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση ΕΠ απαιτεί την χρήση Παραλληλίας.

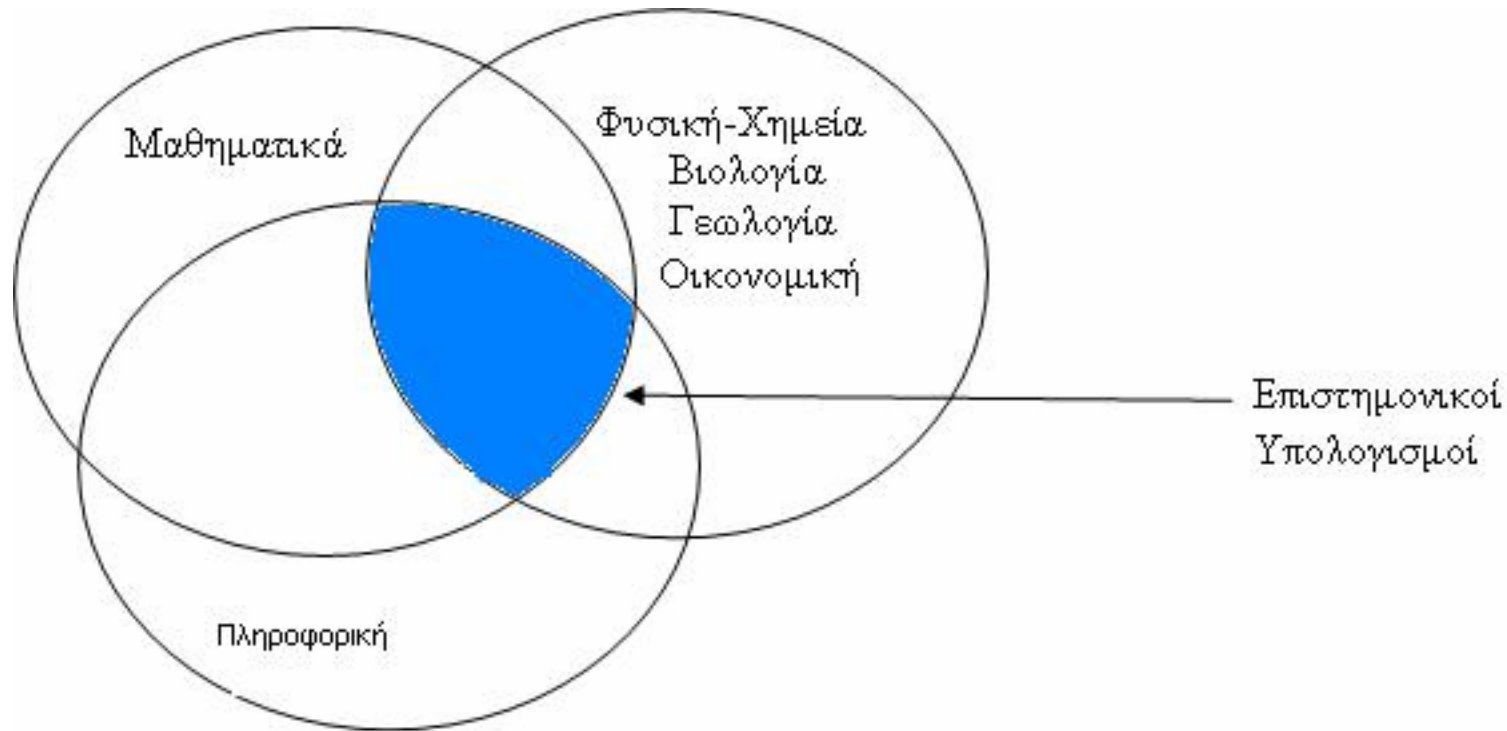


Επιστημονικοί Υπολογισμοί (ΕΥ)

- Η υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων έχει σαν αποτέλεσμα την ανάπτυξη Επιστημονικού Λογισμικού.
- Η αναπαράσταση των αριθμητικών αποτελεσμάτων σε κατάλληλα σχήματα και εικόνες απαιτεί τη χρήση πακέτων γραφικών (π.χ. OpenGL).
- Τέλος, η μοντελοποίηση απαιτεί γνώσεις Φυσικής και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών.

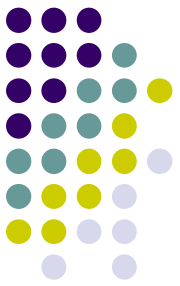


Περιοχή Επιστημονικών Υπολογισμών

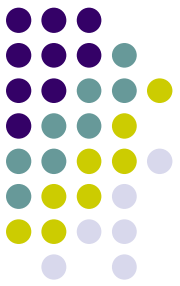


Σχήμα: Η περιοχή των ΕΥ είναι η τομή των Μαθηματικών της Πληροφορικής και όλων των άλλων Επιστημών.

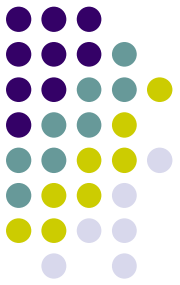
Η περιοχή των ΕΥ εξελίσσεται ραγδαία σε... επιστήμη



- Έχουν δημιουργηθεί
 - Επιστημονικά περιοδικά
 - SIAM J. Scientific Computing
 - Τμήματα σε Πανεπιστήμια
 - Σκανδιναβικές χώρες
 - ΗΠΑ (Φλώριντα)
 - Μεταπτυχιακά Προγράμματα
 - Berkley ΗΠΑ
 - Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών ΕΚΠΑ
 - Ερευνητικά εργαστήρια
 - <http://gauss.cs.ucsb.edu/>
 - <http://www.scl.rs/>

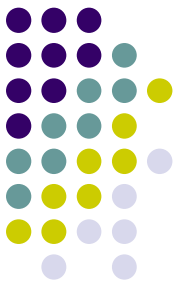


- Αν περιηγηθείτε στο διαδίκτυο θα εκπλαγείτε.
(scientific computing / computational science)
- Διεθνή Συνέδρια
 - Scientific Computing and Applications
<http://www.unlv.edu/centers/cams/sca2012/sca2012.html>
 - Euro Par
 - PARA
 - International Super Computing Conference
- Διεθνή Ερευνητικά Προγράμματα



Τι πρέπει να ξέρω;

- Αριθμητικές μεθόδους.
- Παράλληλες αριθμητικές μεθόδους.
- Γλώσσα Προγραμματισμού.
- Αντικειμενοστραφή Προγραμματισμό (C++, Java)
- Παράλληλο Προγραμματισμό
 - MPI, OpenMP, Προγραμματισμό GPU
- Δομές Δεδομένων
- Αλγόριθμοι και Πολυπλοκότητα.
- Γραφικά.
- Ανάπτυξη Λογισμικού.
- Βάσεις Δεδομένων.
- Δίκτυα (βασικές γνώσεις).



Που θα βρω δουλειά;

- Ένας Μαθηματικός δεν γνωρίζει παράλληλο / αντικειμενοστραφή προγραμματισμό
- Ένας Πληροφορικός δεν γνωρίζει τις αριθμητικές μεθόδους
- Ένας Φυσικός/Χημικός έχει γνώση της Φυσικής αλλά δεν έχει γνώση παράλληλου /αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού
- Το κενό έρχεται να το καλύψουν οι ΕΥ

Που θα βρω δουλειά;

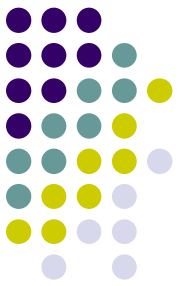


- Στην Ευρώπη / Διεθνή αγορά
 - Σε όλες τις Μετεωρολογικές Υπηρεσίες
 - ECMWF, European Centre for Meteorological Weather Forecast, Αγγλία. <http://www.ecmwf.int/>
 - NOAA, ΗΠΑ <http://www.noaa.gov/>
 - Ερευνητικά Εργαστήρια Επιστημονικού Λογισμικού
 - Laurence Liverpool National Lab, ΗΠΑ
 - <http://www.phy.cam.ac.uk/research/lsc/>



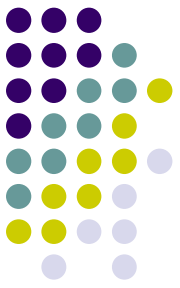
Που θα βρω δουλειά;

- Εταιρείες ανάπτυξης Επιστημονικού Λογισμικού
 - Numerical Algorithms (NAG), Αγγλία
<http://www.nag.co.uk/>
 - IMSL, ΗΠΑ
<http://www.roguewave.com/products/imsl-numerical-libraries.aspx>
- Εργαστήρια Μετεωρολογίας στα Πανεπιστήμια
<http://jobs.phds.org/scientific-computing-jobs>



Που θα βρω δουλειά;

- Ελλάδα
 - ΕΜΥ, ΕΛΚΕΘΑ, ΕΙΕ, ΙΓΜΕ, Δημόκριτο, Αστεροσκοπείο.
 - Εργαστήρια Μετεωρολογίας στα Πανεπιστήμια (ερευνητικά προγράμματα).
 - Στρατό, Υπηρεσία Πληροφορικής
 - Εταιρείες Επιστημονικού λογισμικού
<http://www.mentorhellas.com/>



Σας ευχαριστώ για την προσοχή σας

