

Επιστημονικός Υπολογισμός

Ε.Γαλλόπουλος

ΤΜΗΥΠ, Π. Πατρών

Διάλεξη 1: 4 Οκτωβρίου 2017

- 1 Εισαγωγή
- 2 Το μάθημα σε λίγα λόγια: Τι, Γιατί, Πώς?
- 3 Διαδικαστικά
- 4 CSE και μοντέλα
- 5 Υπολογιστικοί πυρήνες

©Ε. ΓΑΛΟΠΟΥΛΟΣ - CEID

Today, to Out-Compute is to Out-Compete



SPECIAL STUDY

A Strategic Agenda for European Leadership in Supercomputing: HPC 2020 — IDC Final Report of the HPC Study for the DG Information Society of the European Commission

Earl C. Joseph, Ph.D.
Chris Ingle
Cyril Meunier

Steve Conway
Gabiella Cattaneo
Nathaniel Martinez

IDC OPINION

This is the Strategic Agenda Report (Deliverable D3) of the study "Development of a Supercomputing Strategy in Europe" by IDC EMEA, the multinational market research and consulting company specialized in ICT markets, on behalf of DG Information Society and Media of the European Commission.

This report presents the results of WP3 — Strategic Agenda. The recommendations in this report are by IDC. We thank the Technical Strategic Committee contributors for

- ΤΙ** Ο ΕΥ ασχολείται με βασικά θέματα που αφορούν στην ανάπτυξη και στην αποδοτική χρήση υπολογιστικών εργαλείων που βοηθούν στην πρακτική χρήση των μαθηματικών μοντέλων της επιστήμης και της τεχνολογίας.
- ΓΙΑΤΙ** Προσφέρει τις βασικές γνώσεις για το σχεδιασμό και την υλοποίηση λογισμικού για αποδοτικούς υπολογισμούς (με μυριάδες εφαρμογές, όπως σε προσομοιώσεις στη σχεδίαση κυκλωμάτων, στους οικονομετρικούς υπολογισμούς, στην ιεράρχηση ιστοσελίδων και στην ανάκτηση πληροφορίας από το Web).
- ΠΩΣ** Αναπτύσσεται το υπόβαθρο για τον σχεδιασμό αποδοτικών προγραμμάτων για σύγχρονες αρχιτεκτονικές Η/Υ για σημαντικά υπολογιστικά προβλήματα μεγάλης κλίμακας. Δομείται μέσω των μοντέλων (κυρίως υπολογιστικού & αριθμητικού, διακριτό μοντέλο εν συντομία) και στη χρήση τους για την πρόβλεψη της επίδοσης και σφάλματος σε σύγχρονους υπολογισμούς.

Ο Επιστημονικός Υπολογισμός στηρίζεται στην πρόοδο που έχει γίνει σε πολλούς τομείς στην επιστήμη και τεχνολογία των Η/Υ

HY110 (2ο εξ.): Γραμμική Άλγεβρα

HY240 (4ο εξ.): Αριθμητική Ανάλυση & Περιβάλλοντα

HY261 (3ο εξ.): Αρχιτεκτονική Υπολογιστών I

HY205 3ο εξ.: Εισαγωγή στους Αλγορίθμους

HY440 4ο εξ.: Παράλληλη Επεξεργασία

και επηρεάζει καταλυτικά πάρα πολλές περιοχές εντός και εκτός ΤΜΗΥΠ ...

Τετ. (13-15), Παρ. (11-13) Να παρακολουθώ τις διαλέξεις & Φροντιστήρια (BA)

Πέμπτη 11-13 να συμμετέχω (όταν υπάρχει σχετική ανακοίνωση) στο εργαστήριο (Υ/Κ)

e-Class να γραφτώ στο e-Class “Επιστημονικός Υπολογισμός (νέο)” (password ?)

e-Class να παρακολουθώ Ανακοινώσεις & Ημερολόγιο μαθήματος

Ασκήσεις να τις υποβάλω έγκαιρα

ΠΡΟΣΟΧΗ οι παλαιότεροι: ΧΡΕΙΑΖΕΣΤΕ ΕΠΑΝΕΓΓΡΑΦΗ ΣΤΟ eClass!

Όπως και στα “Γραμμική Άλγεβρα” και “Αριθμητική Ανάλυση & Περιβάλλοντα Υλοποίησης”

UPatras eClass Τα πάντα για το μάθημα - **χρειάζεται εγγραφή!**

myceid forum ΔΕΝ ΤΟ ΠΑΡΑΚΟΛΟΥΘΟΥΜΕ!

Πληροφορίες Ώρες γραφείου, προγραμματισμό μαθήματος, ανακοινώσεις.

Πηγές Συγγράμματα (με κωδικό).

Ημερολόγιο μαθήματος (εκ των υστέρων) παράθεση στοιχείων που συζητήσαμε στο μάθημα και σύνδεση με τις διαφάνειες.

Κανόνες σχετικά με τον τρόπο αξιολόγησης.

Το portal για το μάθημα θα είναι το eClass

Η επικοινωνία για το μάθημα γίνεται ΑΠΟΚΛΕΙΣΤΙΚΑ μέσω Μηνυμάτων e-class - διαφορετικά δεν απαντάμε!

Η αξιολόγηση επίδοσης στο μάθημα θα προκύψει από τα εξής¹:

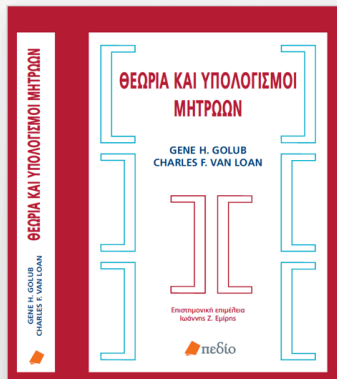
Εξέταση Τελική (οι βαθμοί όσων προσέρχονται καταχωρούνται)

Ασκήσεις Εργαστηριακού τύπου

Συμμετοχή Συμβάλλει θετικά η ενεργή παρουσία και συμμετοχή με χρήσιμες παρεμβάσεις, ερωτήσεις και παρατηρήσεις.

Οι ερωτήσεις στην εξέταση έχουν για στόχο: α) Να αναδειχτεί ο βαθμός κατανόησης των βασικών εννοιών του μαθήματος και των εργαστηριακών ασκήσεων από τους φοιτητές καθώς και η ικανότητα διαχείρισής τους. β) Να δοθεί η ευκαιρία στους φοιτητές να προετοιμαστούν στο σύνολο της ύλης με επακόλουθο το καλύτερο “δέσιμο” των εννοιών και η αναγνώριση όποιων αδυναμιών τους. Σε κάθε περίπτωση, η επιτυχής εκπλήρωση της εξέτασης πρέπει να είναι φυσικό επακόλουθο της συστηματικής παρακολούθησης του μαθήματος και όχι αυτοσκοπός.

¹: περισσότερες πληροφορίες θα δοθούν σε επόμενη διάλεξη.

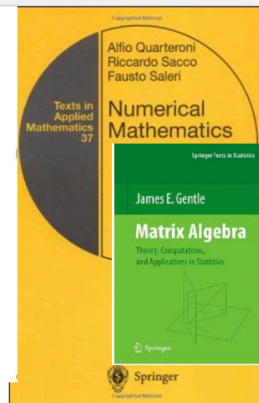


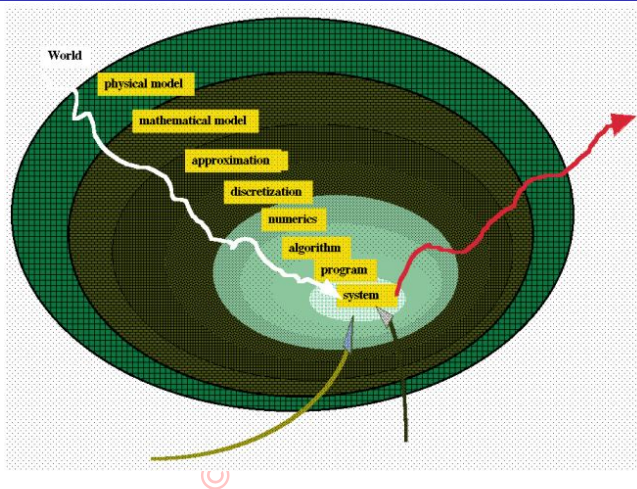
ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Καθηγητής

ΗΥ343
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής
Πανεπιστήμιο Πατρών

Φθινόπωρο 2011
©2011, Ευστράτιος Γαλλόπουλος





Σχήμα: CSE και μοντέλα: Από το άρθρο G.+Sameh'97, "CSE: Content and Product", IEEE CSE Magazine, 1997. Το μέγεθος του πλέγματος υποδεικνύει το βαθμό ετερογένειας στο "λεξιλόγιο" διαφορετικών θεματικών περιοχών του ίδιου στρώματος.

“More and Different: Notes from a thoughtful curmudgeon” BCS and Me” (Philip W. Anderson)

Actually, in almost every case where I have been really successful it has been by dint of discarding almost all of the apparently relevant features of reality in order to create a “model” which has two almost incompatible features:

- 1 enough simplicity to be solvable, or at least understandable;
- 2 enough complexity left to be interesting, in the sense that the remaining complexity actually contains some essential features which mimic the actual behavior of the real world,

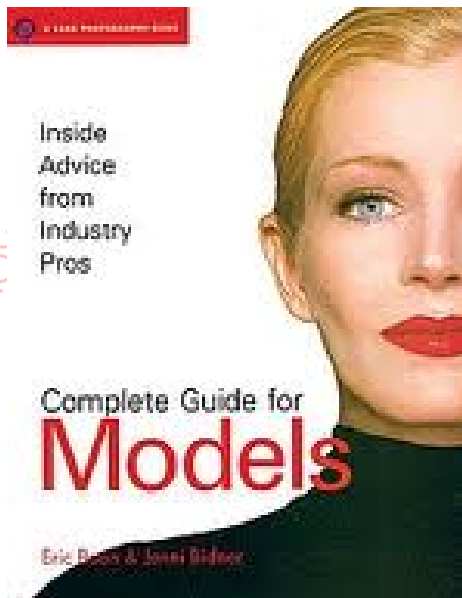
THE GRAND CHALLENGE EQUATIONS

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{B}_i \mathbf{A}_i = \mathbf{E}_i \mathbf{A}_i + \rho_i \sum_j \mathbf{B}_j \mathbf{A}_j \mathbf{F}_{ji} \quad \nabla \times \vec{\mathbf{E}} = - \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} \quad \vec{\mathbf{F}} = m \vec{\mathbf{a}} + \frac{d\mathbf{m}}{dt} \vec{\mathbf{v}} \\
 & dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S dV \quad \nabla \cdot \vec{\mathbf{D}} = \rho \quad Z = \sum_j g_j e^{-E_j/kT} \\
 & F_j = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{2\pi i j k / N} \quad \nabla^2 u = \frac{\partial u}{\partial t} \quad \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \frac{\partial \vec{\mathbf{D}}}{\partial t} + \vec{\mathbf{j}} \quad P(t) = \frac{\sum_i W_i B_i(t) P_i}{\sum_i W_i B_i(t)} \\
 & \quad \quad \quad p_{n+1} = r p_n (1 - p_n) \quad \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 \\
 & - \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V \Psi(\mathbf{r}, t) = - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad -\nabla^2 u + \lambda u = f \\
 & \frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\vec{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \vec{\mathbf{u}} = - \frac{1}{\rho} \nabla p + \gamma \nabla^2 \vec{\mathbf{u}} + \frac{1}{\rho} \vec{\mathbf{F}} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f
 \end{aligned}$$

• NEWTON'S EQUATIONS • SCHRÖDINGER EQUATION (TIME DEPENDENT) • NAVIER-STOKES EQUATION •
 • POISSON EQUATION • HEAT EQUATION • HELMHOLTZ EQUATION • DISCRETE FOURIER TRANSFORM •
 • MAXWELL'S EQUATIONS • PARTITION FUNCTION • POPULATION DYNAMICS •
 • COMBINED 1ST AND 2ND LAWS OF THERMODYNAMICS • RADIOSITY • RATIONAL B-SPLINE •

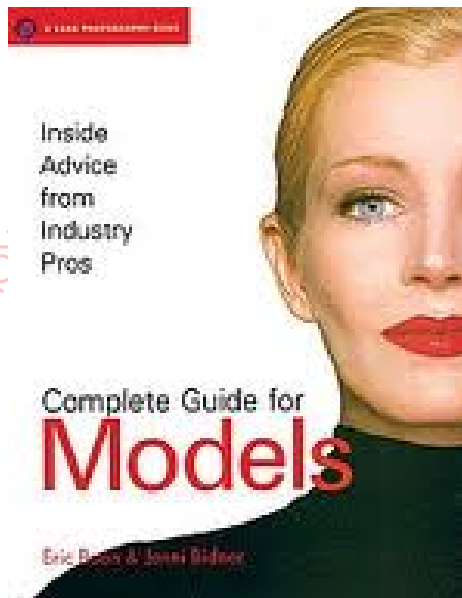
Ω Μένανδρε και βίε πότερος
αρ' υμών πότερος
απεμιμήσατο

©Ε. ΓΑΛΟΠΟΥΛΟΣ

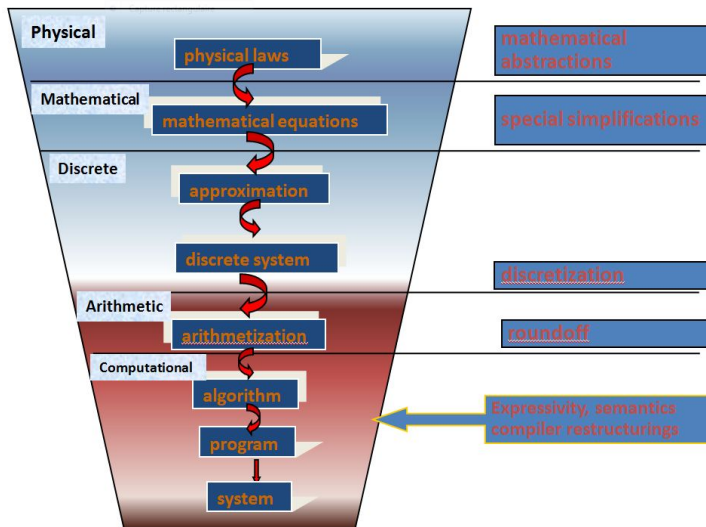


Τι μπορούν να πουν τα μοντέλα?

- Φυσικό
- Μαθηματικό
- Διακριτό
- Αριθμητικό
- Υπολογιστικό



Μοντέλα: Διαδρομές και Απώλεια Πληροφορίας



HOW TO GET THE MOST OUT OF AN EQUATION WITHOUT REALLY TRYING*

RUTHERFORD ARIS

University of Minnesota

Minneapolis, Minnesota 55455

MAXIMS FOR MATHEMATICAL MODELLING

1. Cast the problem in as elegant a form as possible.
2. Choose a sympathetic notation, but don't become too attached to it.
3. Make the variables dimensionless, since this is the only way in which their magnitudes take on general significance, but do not lose sight of the quantities which may have to be varied later on in the problem nor forget the physical origin of each part.
4. Use a priori bounds of physical or mathematical origin to keep all variables of the same order of magnitude, letting the dimensionless parameters show the relative size of the several terms.
5. Think geometrically. See when you can reduce the number of variables (even at the expense of first treating an over-simplified problem), but keep in mind the needs of the general case.
6. Use rough and ready methods, but don't carry them beyond their point of usefulness. (E.g. Isoclines in the phase plane).
7. Find critical points and how the system behaves near them or what is asymptotic behaviour is at long or short times.
8. Check limiting cases and see how they tie in with simpler problems that can be solved explicitly.
9. Use crude approximations, e.g. 1-point collocation. Trade on the analogies they suggest, but remember their limitations.
10. Rearrange the problem. Don't get fixed ideas on what are the knowns and what the unknowns. Be prepared to work with implicit solutions.
11. Neglect small terms, but distinguish between regular and singular perturbations.
12. Use partial insights and despise them not. (E.g. Descartes' rule of signs).
13. These maxims will self-destruct. Make your own!

be critically appraised, for, without this critical oversight, the computer can produce an output more tedious and turgid than the so-called play-boy philosophy. It is in any case part of the 'craft and sullen art' of the engineer or applied scientists to bring his problem into its most responsive formulation and to explore the modes of its solution as delicately as possible before proceeding to its complete analysis. From one point of view it requires sensibilities which are 'nascitur non fit,' but from another it is surely an art we may all strive after even if we despair of its mastery.

Of the texts on applied mathematics and engineering analysis the best may perhaps instruct by example, but only Segel and Lin's recent masterpiece [1] attempts to unfold some of the techniques of right formulation. There the question of reduction to dimensionless form and the scaling of equations is carefully and systematically explained. It will be clear that this essay is influenced by what they have done, both in this regard and in the play they have given to perturbation methods. The maxims of modelling that I have ventured to set down are a preliminary attempt to codify some of the mental processes of the chemical engineer as he probes and explores a problem. Like all maxims they tend to have the unassailable probity of "this ye ought to have done and not to have left the other undone."

*EDITOR'S NOTE: In this issue, CEE begins a new department: ChE LECTURES. We intend to publish seminars and lectures on important areas of modern chemical engineering. If you feel that one of your

Από την (γνωστή) αποτελεσματικότητα των Μαθηματικών στα **BIG DATA**!

“The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences” (Wigner’60)

“... the enormous usefulness of mathematics in the natural sciences is something bordering on the mysterious and that there is no rational explanation for it. ... The miracle of the appropriateness of the language of mathematics for the formulation of the laws of physics is a wonderful gift which we neither understand nor deserve. We should be grateful for it and hope that it will remain valid in future research and that it will extend, for better or for worse, to our pleasure, even though perhaps also to our bafflement, to wide branches of learning...”

Παρόμοιος τίτλος χρησιμοποιήθηκε από τους Halevy, Norvig, Pereira της Google σε πρόσφατο άρθρο τους στο IEEE Intelligent Systems:

“The Unreasonable Effectiveness of Data” (HalevyNorvigPereira’09)

Perhaps when it comes to natural language processing and related fields, we’re doomed to complex theories that will never have the elegance of physics equations. But if that’s so, we should stop acting as if our goal is to author extremely elegant theories, and instead embrace complexity and make use of the best ally we have: the unreasonable effectiveness of data.


- Στον ΕΥ συνήθως πλοηγούμε μεταξύ Διακριτού, Αριθμητικού και Υπολογιστικού μοντέλου.
- Τα μοντέλα **βοηθούν** στο να προβαίνουμε σε **προβλέψεις** σχετικά με την **ταχύτητα**, την **ακρίβεια** και τα **κόστη** των υπολογισμών,
- ... να προσαρμόζουμε μεθόδους και εργαλεία
- ... και εντέλει να βελτιώνουμε τη **συνολική επίδοση**.

- Στον ΕΥ συνήθως πλοηγούμε μεταξύ Διακριτού, Αριθμητικού και Υπολογιστικού μοντέλου.
- Τα μοντέλα **βοηθούν** στο να προβαίνουμε σε **προβλέψεις** σχετικά με την **ταχύτητα**, την **ακρίβεια** και τα **κόστη** των υπολογισμών,
- ... να προσαρμόζουμε μεθόδους και εργαλεία
- ... και εντέλει να βελτιώνουμε τη **συνολική επίδοση**.

Κριτήρια

- **ταχύτητα** ... να παράγουμε γρήγορα τα αποτελέσματα (time to solution)
- **ακρίβεια** ... τα αποτελέσματα να είναι αξιόπιστα
- **κόστος** ... οι πόροι να είναι εντός προϋπολογισμού
- **ενέργεια** ... οι υπολογισμοί να είναι ενεργειακά αποτελεσματικοί
- **προϊόν** ... να εξυπηρετούμε ανάγκες των χρηστών, να παρέχονται επαναχρησιμοποιήσιμες υλοποιήσεις π.χ. σε μορφή λογισμικού, κ.λπ.

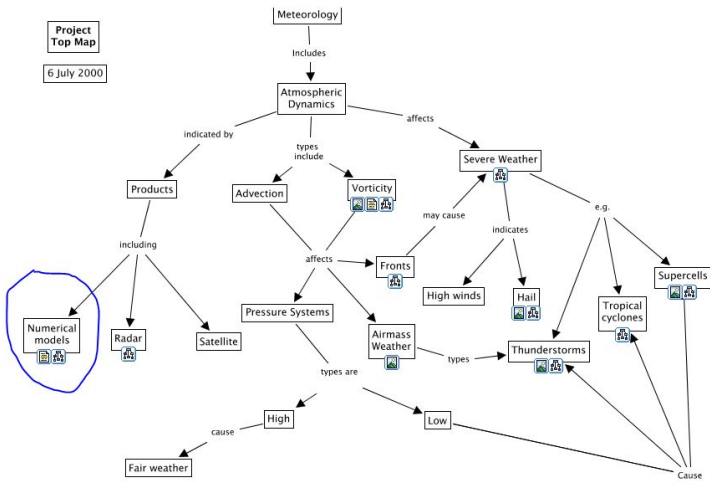
- πόσο γρήγορα επιτυγχάνεται η λύση?
 - υπολογιστική πολυπλοκότητα και μεταφορές
 - αποτελεσματική χρήση των πόρων
- πόσο ακριβή είναι τα αποτελέσματα?
 - → συγκριτικά με τη θεωρητική λύση? σε σχέση με εναλλακτικές μεθόδους? σε σχέση με τα δεδομένα εισόδου?
- Πόσο στοιχίζει η υλοποίηση?
- Ποιές είναι οι ενεργειακές ανάγκες?
- Πώς αξιολογούνται οι πόροι που χρησιμοποιήθηκαν?

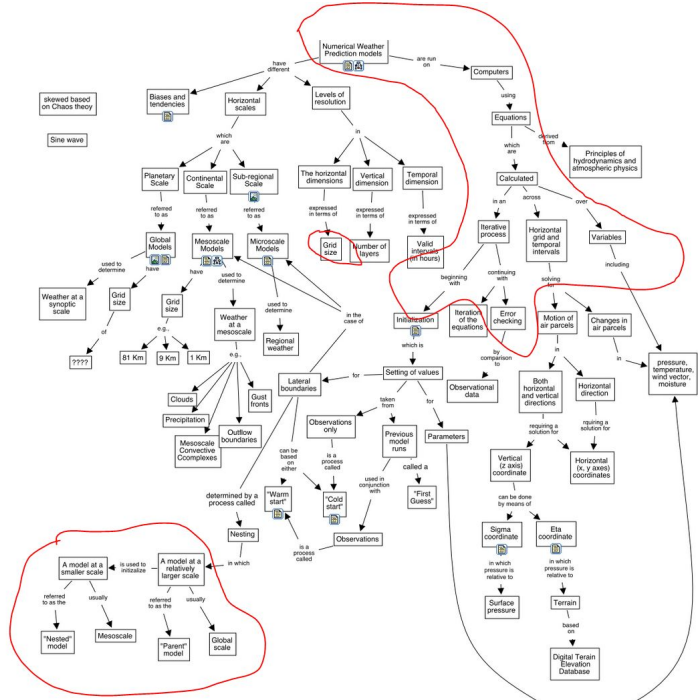
- **Προσομοίωση in silico:** Έχει καταστεί ομότιμος τρόπος επιστημονικής έρευνας καθώς σε πάρα πολλές περιπτώσεις, τα πειράματα δεν αποτελούν επιλογή π.χ. λόγω κόστους, επικινδυνότητας, καταστροφικών επιπτώσεων, κ.λπ.
 - **Ανάλυση (μεγάλων) δεδομένων**
 - Γραφικά
 - Εφαρμογές πραγματικού χρόνου
- 
- Σχεδιασμός και υλοποίηση
 - ((Πακετάρισμα)) σε βιβλιοθήκες
 - Πακέτα ως προϊόντα



ΔΥΣΚΟΛΙΑ/ΠΡΟΚΛΗΣΗ: Ο ΙΛΙΓΓΟΣ της διαδρομής







Μοντέλα πρόβλεψης του 2006 στο ECMWF (Lyn08))

10μερη μοντέλο (25 km) 91-level,
2/ημέρα

30μερη μοντέλο (78 km) 62-level,
2/ημέρα

180μερη μοντέλο (125 km) 40-level,
1/μήνα

The screenshot displays the ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) website. The header includes the ECMWF logo and navigation links: Home, Data, News, Links, Contact, Feedback, Site Map, Search. Below the header, there are tabs for 'About Us', 'Products', 'Services', 'Partners', 'Publications', and 'Media/Events'. The main content area is titled 'European Centre for Medium-Range Weather Forecasts' and features a large graphic of a globe with weather patterns. To the right of the globe, there is a section titled 'Hot Links' with various icons and text links. Below the globe, there is a section titled 'News & Events' with a list of recent news items. To the left of the globe, there is a section titled 'Partners' with a list of partner organizations. At the bottom of the page, there is a section titled 'ECMWF Newsletter' with a list of recent newsletter issues.

3442

P. Lynch / Journal of Computational Physics 227 (2008) 3431–3444

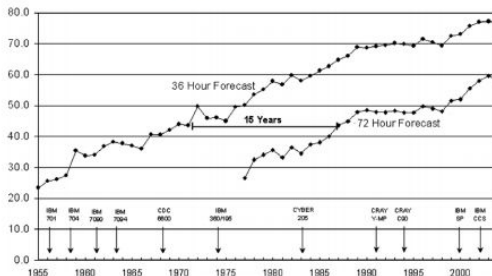


Fig. 4. Skill of the 36 hour (1955–2004) and 72 hour (1977–2004) 500 hPa forecasts produced at NCEP. Forecast skill is expressed as a percentage of an essentially perfect forecast score. Thanks to Bruce Webster of NCEP for the graphic of S1 scores.

Θέση 1 (GS97)

Ο Επιστημονικός Υπολογισμός χαρακτηρίζεται από διαδρομές μεταξύ των μοντέλων ιδιαίτερα μεταξύ του υπολογιστικού, του αριθμητικού και του διακριτού.

Θέση 2 (GS97)

"If there is no end to CSE that will be the end of CSE." Προτείνουμε ως προϊόν τα Περιβάλλοντα Επίλυσης Προβλημάτων (Problem Solving Environments) π.χ. συστήματα όπως η MATLAB.

Εφαρμογές και Υπολογιστικοί Πυρήνες (DKLS86)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Lattice Gauge (QCD)	*	.	.	*	*
quantum mechanics	.	.	.	*	.	.	*	*	*
meteorology	*	*	.	.	.
CFD	*	.	*	.	*	*	.	.	.
geodesy	*	*
inverse problems	.	*	.	.	*
structures	*	.	*	*
circuit simulation	*	.	*	.	.	.	*	.	.
electromagnetics	*	*	*	*	*	*	.	.	.
financial	*	*	*	.	.	.	*	*	*
IR, Machine Learning	*	*	.	*	.	.	.	*	.
DS& Image P.	*	*	*	.	*	*	.	.	*
Internet Algorithmics	*	*	.

- | | | |
|-----------------------|---------------------------|--------------------------------|
| 1. γραμμικά συστ. | 2. ελάχιστα τετράγωνα | 3. μη γραμμικά συστ. |
| 4. ιδιοδιασπάσεις/SVD | 5. ταχείς μετασχηματισμοί | 6. ταχείς ελλειπτικοί επιλυτές |
| 7. άκαμπτες ΔΕ | 8. Μόντε Κάρλο | 9. ολοκληρωματικοί μετασχ. |

μετασχηματισμοί ((κρυμμένοι)) ως Μητρώα/ συλλογές δεδομένων ((κρυμμένοι)) ως μητρώα

Υπολογισμοί με **μητρώα** στον **πυρήνα**

Υπολογιστικός πυρήνας

Τμήματα κώδικα που μπορεί να αντιστοιχούν σε κάποια μαθηματική πράξη (π.χ. πολλαπλασιασμός μητρώων, λύση συστήματος, υπολογισμός ιδιοδιανυσμάτων), όπου αναλώνεται μεγάλος χρόνος εκτέλεσης σε σχέση με άλλα τμήματα του κώδικα.

Εύρημα - αφορά προγράμματα με υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας

- 1 Μεγαλύτερος χρόνος υπολογισμών αναλώνεται σε εκτέλεση βρόχων.
- 2 Υπολογισμοί με μητρώα είναι **υπολογιστικοί πυρήνες** των περισσότερων σημαντικών εφαρμογών.



Η **Υπολογιστική Γραμμική Άλγεβρα** είναι όχημα για την παρουσίαση των τεχνικών του ΕΥ

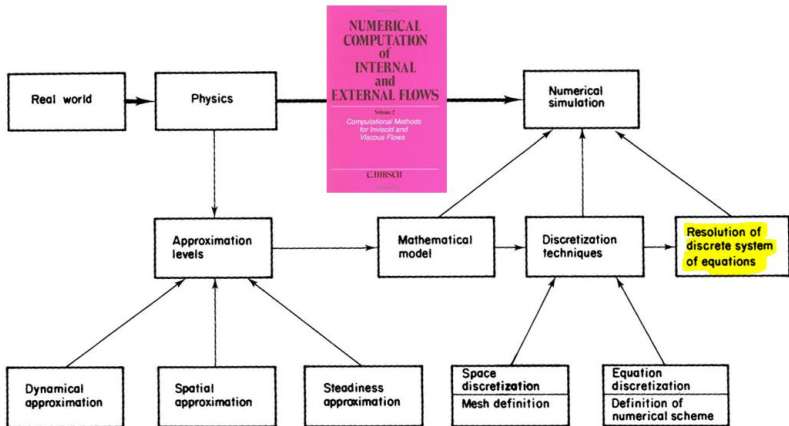


Figure I.1 Computational models

Intel' RMS: Recognition, Mining, Synthesis (Dub05)

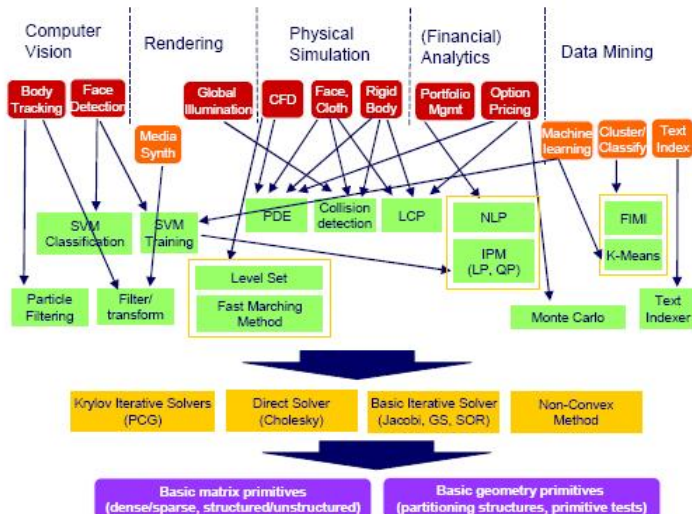
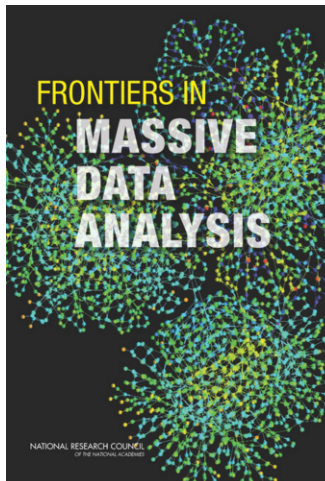


Figure 5. Intel's RMS and how it maps down to functions that are more primitive. Of the five categories at the top of the figure, Computer Vision is classified as Recognition, Data Mining is Mining, and Rendering, Physical Simulation, and Financial Analytics are Synthesis. [Chen 2006]



- 1 Basic statistics,
- 2 Generalized N-body problem,
- 3 Graph-theoretic computations,
- 4 **Linear algebraic computations,**
- 5 Optimization,
- 6 Integration, and
- 7 Alignment problems.

Ο πυρήνας ... του πυρήνα ... του πυρήνα

Προσοχή Υπολογισμοί με μητρώα μπορεί συνήθως έχουν **ιεραρχική** δομή: π.χ.

$Ax = b$	λύση συστήματος	DGESV
	↓	
CD	πολ/σμός μητρώων	DGEMM
	↓	
$u^T v$	εσωτερικό γινόμενο	DDOT

Γιατί να ασχοληθούμε με υπολογιστικούς πυρήνες?

- Συνήθως οι εφαρμογές είναι μεγάλης κλίμακας,
- Πολλές γραμμές πολύπλοκου κώδικα
- Συχνά αποτελούμενες από κώδικα σε περισσότερες από μια γλώσσες
- Μεγάλο μέγεθος δεδομένων
- Υπολογισμοί υψηλής πολυπλοκότητας

Εύρημα

Ακόμα και «μέτρια» επιτάχυνση συχνά καλούμενων υποπρογραμμάτων /υπολογιστικών πυρήνων συνήθως έχει πολλαπλασιαστικό αποτέλεσμα και επιφέρει μεγάλη συνολική επιτάχυνση



E. Davidson, D. Kuck, D. Lawrie, and A. Sameh.

Supercomputing tradeoffs and the Cedar system.

Technical Report 577, Center for Supercomputing Research and Development, Urbana, May 1986.



P. Dubey.

A Platform 2015 Workload Model Recognition, Mining and Synthesis Moves Computers to the Era of Tera: Executive Summary.

White paper, Microprocessor Technology Lab, Intel Corporation, 2005.



E. Gallopoulos and A.H. Sameh.

CSE: Content and product.

IEEE Computational Science & Engineering Mag., 4(2):39–43, 1997.



P. Lynch.

The origins of computer weather prediction and climate modeling.

J. Comput. Phys., 227:3431–3444, 2008.

©Ε. ΓΑΛΟΠΟΥΛΟΣ - CEID