Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα 1 : Εισαγωγή

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο **«Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών»** έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοπός Ενότητας

- Τι είναι ο Επιστημονικός Υπολογισμός (ΕΥ)·
- Γιατί ασχολούμαστε με τον ΕΥ·
- Τι είναι Υπολογιστικοί Πυρήνες; Ποιά είναι τα βασικά προβλήματα της αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας.

Περιεχόμενα

1. Τι και Γιατί ΕΥ;
2. CSE και μοντέλα

Τα μάθημα .... σε 3 λόγια

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).

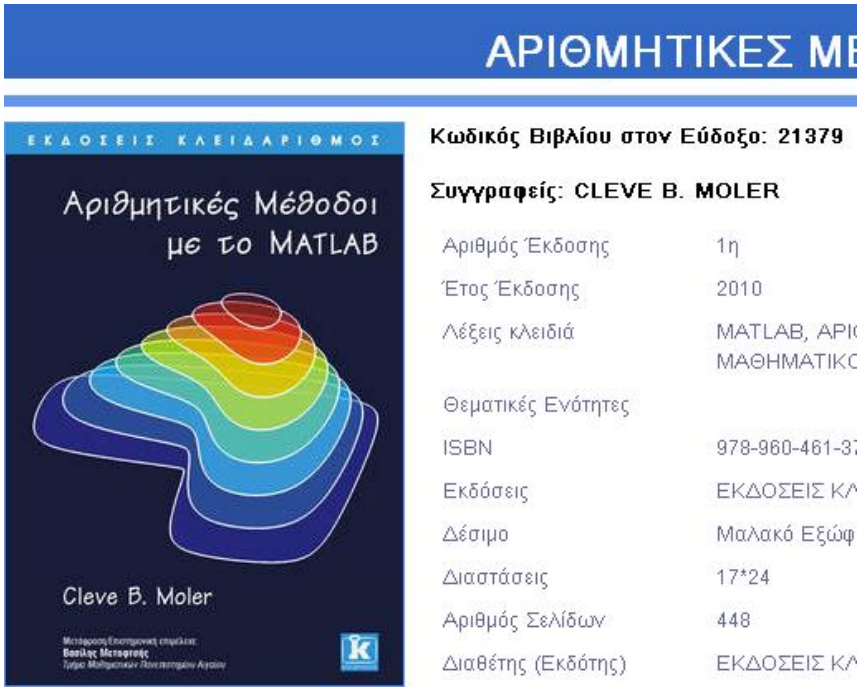
ΠΩΣ Αναπτύσσεται το υπόβαθρο για τον σχεδιασμό αποδοτικών προγραμμάτων για σύγχρονες αρχιτεκτονικές Η/Υ για σημαντικά υπολογιστικά προβλήματα μεγάλης κλίμακας. Δομείται μέσω των μοντέλων (κυρίως υπολογιστικού & αριθμητικού, διακριτό μοντέλο εν συντομία) και στη χρήση τους για την πρόβλεψη επίδοσης και σφάλματος σε υπολογισμούς.

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

- Γραμμική Άλγεβρα
- Αριθμητική Ανάλυση και Περιβάλλοντα Υλοποίησης
- Αρχιτεκτονική Υπολογιστών
- θεωρία Αλγορίθμων και Δομές Δεδομένων
- Παράλληλη Επεξεργασία, Παράλληλοι Αλγόριθμοι

και επηρεάζει καταλυτικά πάρα πολλές εφαρμογές

Πηγές



ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Καθηγητής

ΗΥ343
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής
Πανεπιστήμιο Πατρών

Φθινόπωρο 2011
©2011, Ευστράτιος Γαλλόπουλος

"New" methodology

experiment

theory

computation
«science in silico»

Γατί; Μερικές απόψεις

Άποψη «Μαθηματικών» (Rheinboldt report'84)

... use of modern computers ... has led to the inescapable conclusion that a third branch of scientific methodology has been created. It is now widely acknowledged that, along with the traditional theoretical and experimental methodologies, advanced work in all areas of science and technology has come to rely critically on the computational approach.

Άποψη «Φυσικών» (Atlee Jackson'95)

... computer experiments can both be a two-way bridge between Physical Experiments and Mathematical Models, as well as an independent source of physical understanding. Such experiments have a mind-bending potential for future explorations of nature's secrets, which is only vaguely recognized today.

Γιατί;

Άποψη των Computational Scientists (Alpern & Carter'94)

... dramatic increases in computing power are necessary but insufficient to making high-performance computing a reality. Necessary is also the construction of a large body of applications capable of using that computational power effectively.

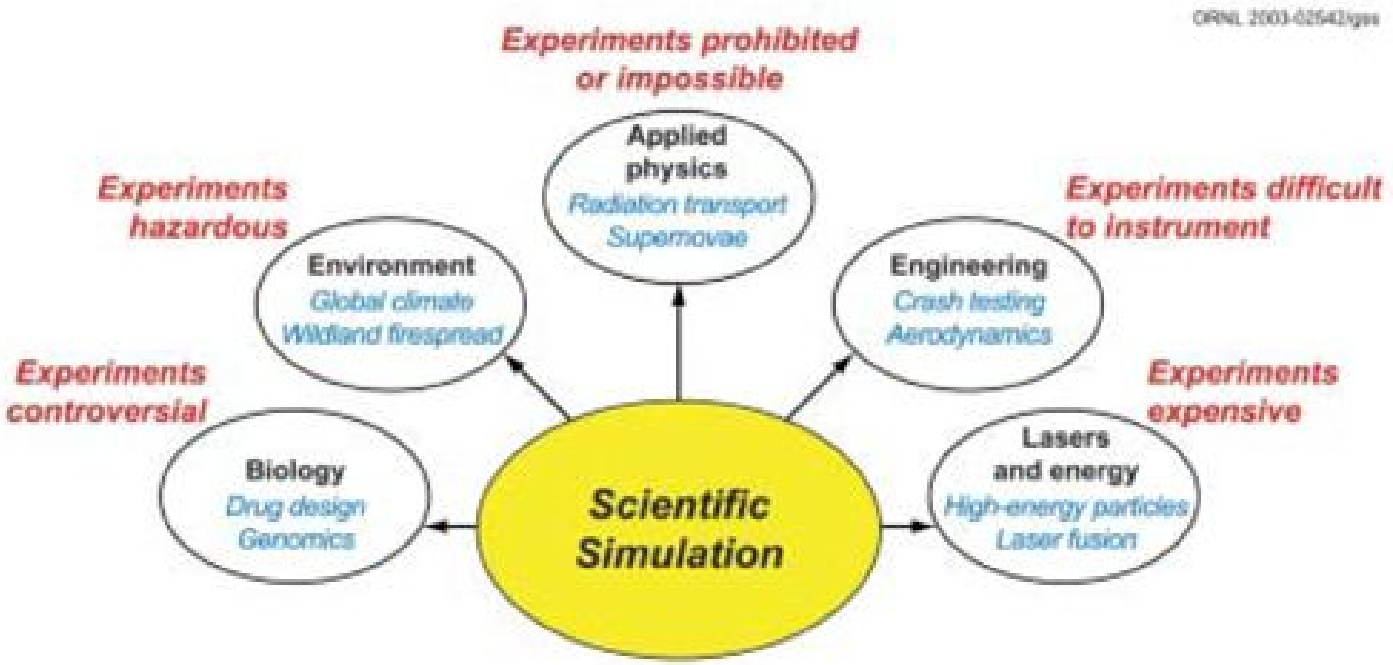


Figure 2. Practical strains on experimentation that invite simulation as a peer modality of scientific investigation.

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
Gabriella 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

IACS cmcs

CMCS - Modelling and Scientific Computing - Prof. Alfio QUARTERONI

EPFL > SB > SMA > IACS > CMCS

Alinghi Team, Defender of the America's Cup (more), and of **Solar Impulse** (more, [pic.])

Defender of the 32nd America's Cup

Valencia (Spain), July 3rd, 2007 - Alinghi, the Defender of the America's Cup wins the 32nd America's Cup with a 5-2 victory over the Challenger Emirates Team New Zealand at the end of a 2 second win in the deciding seventh race. CMCS has supported the Alinghi Design Team in the optimization of the boat performances using advanced numerical tools for CFD and fluid-structure interaction (read more).

Challenger of the 31st America's Cup

Auckland (New Zealand), March 2nd, 2003 - Alinghi, the Swiss Challenger of the America's Cup from the Société Nautique de Genève becomes the first European team to win the America's Cup after a 5-0 score against the Defender, Team New Zealand. CMCS has carried out the numerical simulations for the hydrodynamic and aerodynamic flows around hull, sails and appendages (read more).

Technology powers F1 Williams team

By Monise Durrani
Click On, BBC Radio 4

The Williams Formula 1 car in action in Tur

As the Formula One world waits t season's title, behind the scenes modelling and testing the cars wl tracks next year.

Every millimetre of an F1 car is desig aerodynamics, and underpinning tha incredible amount of technology.

Alex Burns, chief operating officer a said the two wind tunnels at their h currently being used to model next y

More than 1,000 parameters are measured every second during a wind tunnel test, and that information is used by aerodynamicists to understand the effects of very small changes to the car's design.

Increasingly, this physical testing of cars is being complemented by computer simulations.

"This move to a virtual environment is really the big change that is happening in aerodynamics," said Mr Burns.

Computer analysis

Computer analysis known as Computational (CFD) allows the team to visualise the airflo

He said: "In wind tunnel tests or track tests where the air is going or where the pressure

"But with CFD you can actually look at the being generated by items on the car or the you get at various parts of the car."

This year Williams has invested in a new sup enables them to run computer simulations m the past.

A simulation which three years ago took three days to complete can now be done in four hours.

The supercomputer itself fills a room. It is made up of banks and banks of servers, all with multiple processors.

An equivalent piece of equipment could be used to run a small bank (not just one branch, but a whole bank).

Increasingly aerodynamics are being modelled inside a super computer

It ranks in the top several hundred most powerful supercomputers in the world, according to Williams. But its exact capacity is a closely guarded secret.

"It's always interesting for other teams to know what their rivals are doing in terms of software configurations or exact number of processors, so we try not to broadcast them too much" explained Mr Burns.

He thinks that supercomputers will play an ever-more important role in designing the F1 cars of the future.

"We're seeing this steady march to a virtual world. There are regulation changes which are reducing the amount of track testing that we can do, there are limitations in terms of budget as to what we can buy to do physical testing.

'Physical test'

"Historically the computers were used to validate the physical test routines."

He added: "In the future the computers will do most of the work, and the physical tests will be used to validate the output from the computers."

Ανακοίνωση πέρυσι τέτοια εποχή ...

RESEARCH NEWS

Computational chemistry wins Nobel Prize

9 October 2013

Tweet 1

Computer modelling of molecules has gained the Nobel Prize in Chemistry for 2013. According to the official citation, the three Nobellists – Martin Karplus of the Université de Strasbourg, France and Harvard University, USA; Michael Levitt of Stanford University School of Medicine, Stanford, USA; and Arieh Warshel of the University of Southern California, Los Angeles, USA – received the award 'for the development of multi-scale models for complex chemical systems'.

Karplus, Levitt, and Warshel developed a way of modelling complex molecules by using approximations from Newtonian physics alongside quantum chemistry calculations. The strength of classical physics was that calculations were simple and could be used to model really large molecules. However, it offered no way to simulate chemical reactions. But calculations of chemical reactions, using quantum mechanics, required enormous computing power and could therefore only be carried out for small molecules.

Το 2014; Αναμονή ως 7/10 (Φυσική), 8/10 (Χημεία), 13/10 (Οικονομικές Επιστήμες)

Μερική ανάγνωση από την ανακοίνωση I

KUNGL. VETENSKAPS-AKADEMIEN
THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES

Multiscale models for Complex Chemical Systems

The Nobel Prize in Chemistry 2013 has been awarded to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel for development of multiscale models of complex chemical systems.

Background

Chemistry and Biochemistry have developed very rapidly during the last 50 years. This applies to all parts of the fields, but the development of Biochemistry is perhaps the most striking one. In the first half of these 50 years the determination of protein structure was perhaps the field where the largest efforts were spent and the largest progress was made. The standard methods to analyse the structure of proteins are X-ray crystallography of crystals or analysing the spin – spin couplings obtained from NMR-spectroscopy. What is perhaps less well known is that in the computer programs that are used to analyse the diffraction pattern from an X-ray investigation or the spin-spin couplings obtained from a NMR experiment there is hidden a computer code that calculates the energy of the considered structure based on empirically and theoretically obtained potentials describing the interaction between the atoms in the system. The reason for this is that there is not enough experimental information to uniquely determine the structure of the studied system. This is just one of the aspects of how computers and theoretical models have become essential tools for the experimental chemist.

Μερική ανάγνωση από την ανακοίνωση II

... quantum chemical methods can be used for the study of chemical reactions where molecules are formed and destroyed, but they are very demanding with respect to computer time and storage and only smaller systems can be handled...

... The prize focuses on how to evaluate the variation in the energy of the real system in a accurate and efficient way for systems where relatively large geometry changes or changes in electronic configuration in a smaller part of the studied system is strongly coupled to a surrounding that is only weakly perturbed. One way (...) is to develop an efficient computer code based on the Schrödinger equation that makes it possible to handle systems of the size that is required. The Car-Parrinello approach is the leading strategy along this line. It is however still too demanding with respect to computer resources to be able to handle the large systems necessary for biomolecular modelling or extended supra-molecular systems with the required accuracy ...

Κάποιοι είναι καχύπτοπτοι

41. THE COMPUTER: RUIN OF SCIENCE AND THREAT TO MANKIND (1980/1982)

CONTENTS

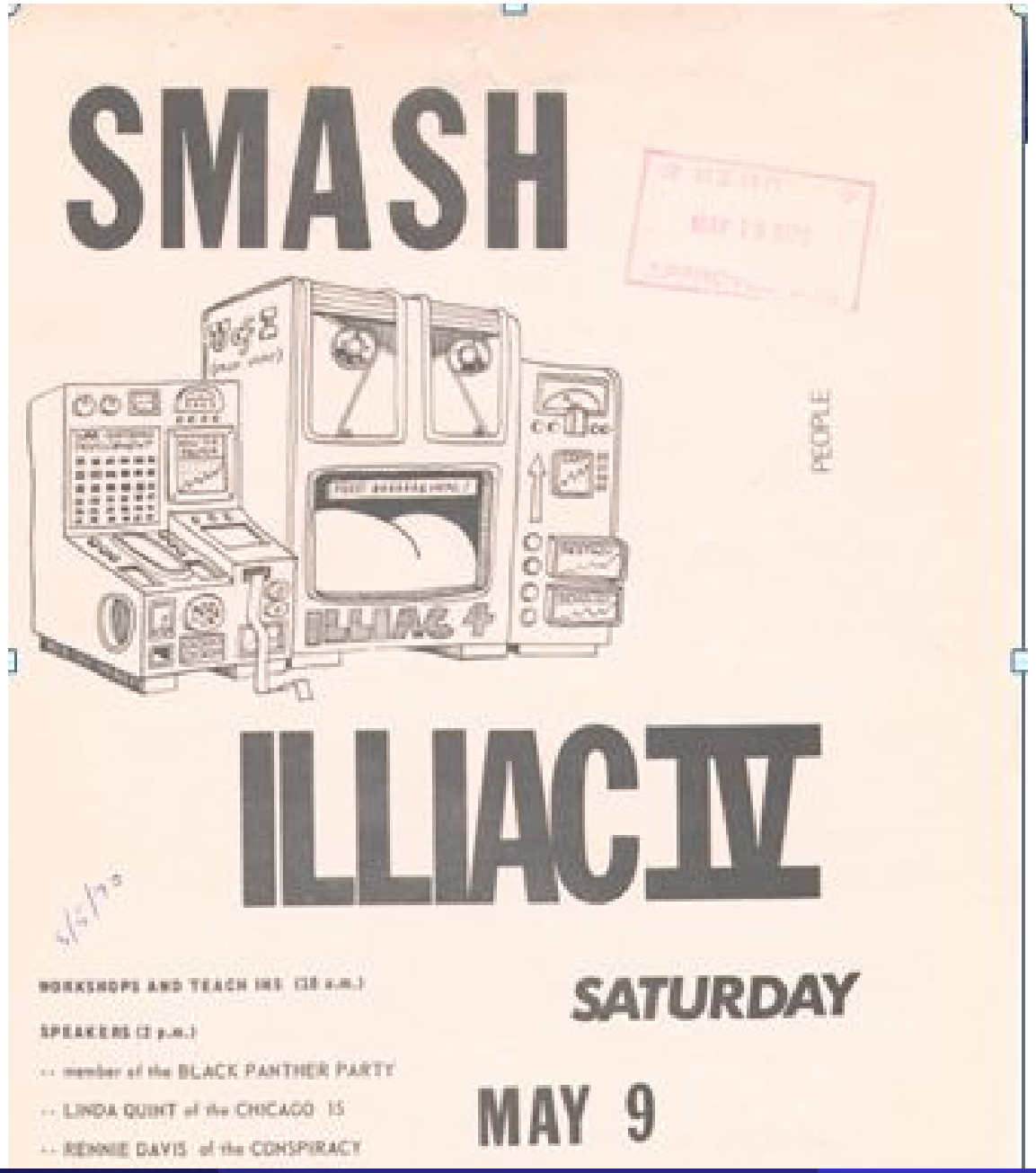
Prefatory Admonition 594
1. Spatial Flight would have been Impossible without Computers 595
2. Spatial Flight would have been Impossible without the Classic Equations of Motion 596
3. Calculation without Classic Standards is Dangerous. A Computer is Incapable of Setting its own Standards 597
4. Computers have Harmed Science Already 601
5. Mathematics is the Science of Infinities. Computation is Essentially Finite 603
6. Computers Bring Power and the Abuses of Power. Advocates of Computing Seek to Destroy Mathematics 611
7. Computing Promotes Factual Fraud. It has Harmed Experimental and Applied Science in the Past and is Continuing to do so. By its Emphasis on Application of the Already Known, it can Delay Basic Discovery and thus Reduce the Field of Application in the Future 615
8. Classic Theories used Inductive and Deductive Models. Computing Encourages Floating Models 622
9. Computing Promotes Logical Fraud. Computers Programmed to Confirm False Theory can Destroy Mankind 625
10. Summary: Computers are Here to Stay. They Endanger Thought, Language, Science, and the Survival of Man. Like any other Dangerous Tool, they should be Put under Strict Controls 627

PREFATORY ADMONITION

This essay is designed to be read by an intelligent layman: one who is expert neither in computing nor in mathematics but is competent in some other science such as chemistry or one of the biologies.

Πανεπιστήμιο Πατρών

... και άλλοι αντιδρούν δυναμικά!



Τι είναι ο Επιστημονικός Υπολογισμός;

(Golub & Ortega (GO93))

Η συλλογή των εργαλείων, τεχνικών και θεωριών που είναι απαραίτητα για την επίλυση σε υπολογιστή των μαθηματικών μοντέλων των προβλημάτων που παρουσιάζονται στην επιστήμη και στην τεχνολογία.

Ας συγκρατήσουμε: Ο σχεδιασμός, η ανάπτυξη, και η αποδοτική χρήση υπολογιστικών εργαλείων που βοηθούν στην πρακτική χρήση των μαθηματικών μοντέλων της επιστήμης και της τεχνολογίας.

(Pironneau (LP98))

Οι λέξεις «επιστημονικός υπολογισμός» δηλώνουν οποιοδήποτε υπολογισμό που είναι χρήσιμος στην Επιστήμη... Η φράση «Επιστημονικός Υπολογισμός» αναφέρεται συνήθως στις αριθμητικές προσομοιώσεις που χρησιμοποιούν οι μηχανικοί (βελτιστοποίηση σχήματος αεροσκαφών, θέματα πυρηνικής ασφάλειας, ...) ή οι φυσικοί (πρόγνωση καιρού, μόλυνση, ...)

Ένας στόχος είναι πολύ συγκεκριμένος

Charles Babbage
1791-1871

"As soon as an Analytical Engine exists, it will necessarily guide the future course of science. Whenever any result is sought by its aid, the question will then arise - **By what course of calculation can these results be arrived at by the machine in the shortest time?"** *Charles Babbage, [Passages from the Life of a Philosopher, 1864]*

Ada Byron Lovelace
1815-1852

- We are interested in the **design, development and effective use** of computational tools that help in the practical use of **mathematical models in Science and Engineering.**
- Get there fast ... Speed
- Without crashing Accuracy/reliability
- Small cost .... VVV rather than RR

Weather and Fluids
Circuit design
System security
Drug design
Games and graphics
Stock exchange

equations – equations – equations ...

Καποιοι το δηλώνουν εμφατικά!

arxiv.org/abs/0709.4024

Cornell University Library

arXiv.org > physics > arXiv:0709.4024

Search or Article-

Physics > Popular Physics

Shut up and calculate

Max Tegmark (MIT)

(Submitted on 25 Sep 2007)

I advocate an extreme "shut-up-and-calculate" approach to physics, where our external physical reality is assumed to be purely mathematical. This brief essay motivates this "it's all just equations" assumption and discusses its implications.

Comments: This is the "director's cut" version of the September 15 2007 New Scientist cover story. For references, see the "full strength" version at arXiv:0704.0646

Ενδιαφέρουν όμως και τα αποτελέσματα!

Κουίζ:

$$
\begin{aligned}
10^{20} - 10 - 10^{20} + 20 &= \\
10^{20} + 20 - 10^{20} - 10 &= \\
-10 + 20 - 10^{20} + 10^{20} &= \\
10^{20} - 10^{20} + 20 - 10 &=
\end{aligned}
$$

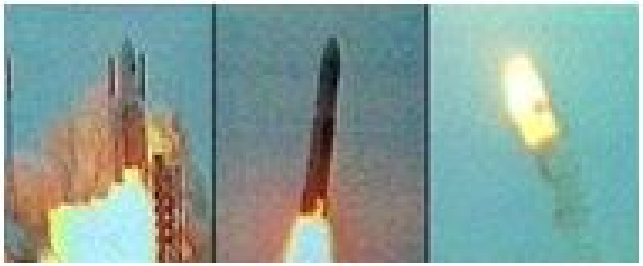
Ενδιαφέρουν όμως και τα αποτελέσματα!

Κουίζ:

$$
\begin{aligned}
10^{20} - 10 - 10^{20} + 20 &= 20 \\
10^{20} + 20 - 10^{20} - 10 &= -10 \\
-10 + 20 - 10^{20} + 10^{20} &= 0 \\
10^{20} - 10^{20} + 20 - 10 &= \mathbf{10}
\end{aligned}
$$

... η αξιοπιστία τους πρέπει να ελέγχεται εξονυχιστικά!

Patriot missile failure, 1991
(28 deaths because of bad rounding)



Explosion of Ariane 5, 1996
(500M because of overflow)

Sinking of Sleipner A offshore platform, 1991
(700M because of inaccurate fem approximation)

- Vancouver stock exchange
  ... and many others

$$$$$ LOSS IN EVALUATING NUMERICAL RELIABILITY

Μετροπρογράμματα ≈ προγράμματα ΕΥ

SPEC CPU2006 Benchmark Descriptions

Descriptions written by the SPEC CPU Subcommittee and by the original program authors [1].
Edited by John L. Henning,
Secretary, SPEC CPU Subcommittee, and Performance Engineer, Sun Microsystems.
Contact john.henning@acm.org

Introduction

On August 24, 2006, the Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC) announced CPU2006 [2], which replaces CPU2000. The SPEC CPU benchmarks are widely used in both industry and academia [3].

The new suite is much larger than the previous, and will exercise new corners of CPUs, memory systems, and compilers – especially C++ compilers. Where CPU2000 had only 1 benchmark in C++, the new suite has 7, including one with ½ million lines of C++ code. As in previous CPU suites, Fortran and C are also well represented.

Since its beginning, SPEC has claimed the motto that

"An ounce of honest data is worth a pound of marketing hype".

To help keep the benchmarking data honest, fair, and relevant, SPEC CPU draws benchmarks from real life applications, rather than using artificial loop kernels or synthetic benchmarks. Therefore, the most important parts of the new suite are the benchmarks themselves, which are described on the pages that follow. In a future issue of Computer Architecture News, information will be provided about other aspects of the new suite, including additional technical detail regarding benchmark behavior and profiles.

References:

[1] Program authors are listed in the descriptions below, which are adapted from longer versions posted at www.spec.org/cpu2006/Docs/. The SPEC project leaders are listed in credits.html at the same location.

[2] SPEC's press announcement may be found at www.spec.org/cpu2006/press/release.html

[3] SPEC's website has over 6000 published results for CPU2000, at www.spec.org/cpu2000/results. Google reports 270,000 hits for the phrase "SPEC CPU2000" as of September 2006.

Μερικές φορές ο στόχος δεν είναι τα τελικά αποτελέσματα

The benchmarks are described in order by category - first the integer benchmarks, then the floating point benchmarks.

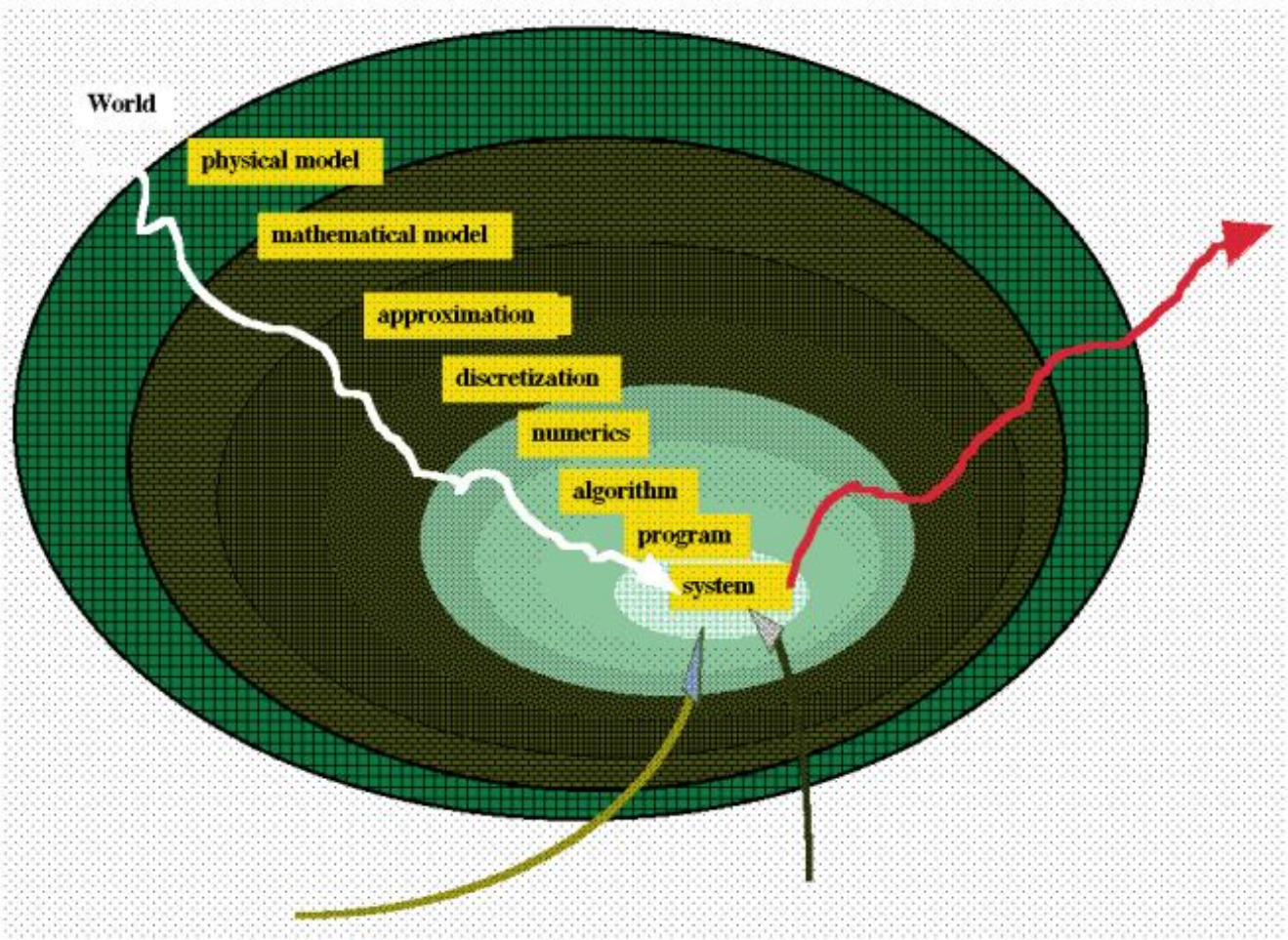
Part 1: Integer Benchmarks

- 400.perlbench
- 401.bzip2
- 403.gcc
- 429.mcf
- 445.gobmk
- 456.hmmer
- 458.sjeng
- 462.libquantum
- 464.h264ref
- 471.omnetpp
- 473.astar
- 483.xalancbmk

Part 2: Floating Point Benchmarks

- 410.bwaves
- 416.gamess
- 433.milc
- 434.zeusmp
- 435.gromacs
- 436.cactusADM
- 437.leslie3d
- 444.namd
- 447.dealII
- 450.soplex
- 453.povray
- 454.calculix
- 459.GemsFDTD
- 465.tonto
- 470.lbm
- 481.wrf
- 482.sphinx3
- 999.specrand

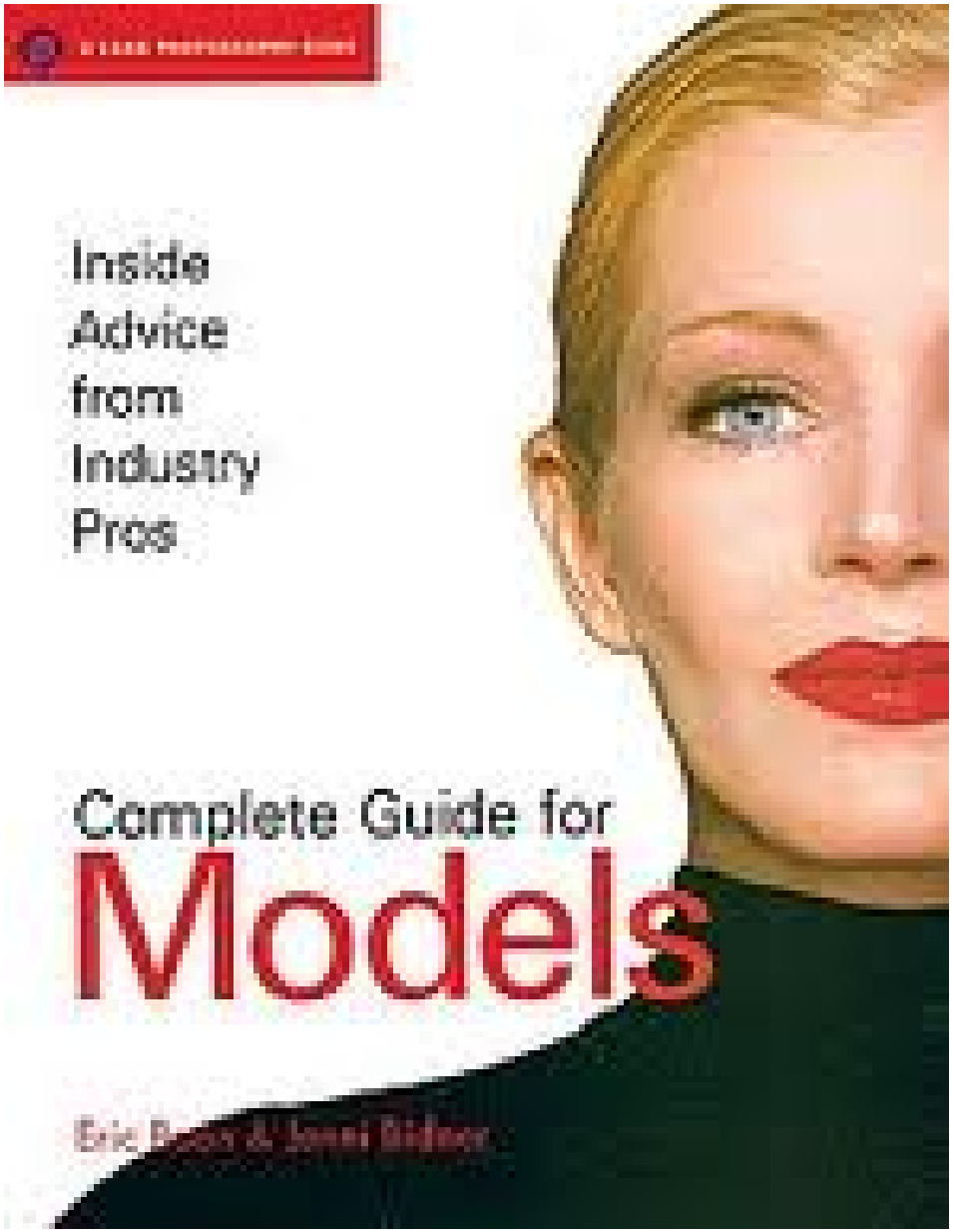
CSE: Υπολογιστική Επιστήμη και Τεχνολογία



Σχήμα: CSE και μοντέλα: Από το άρθρο EG+Sameh'97, ``CSE: Content and Product'', IEEE CSE Magazine, 1997.

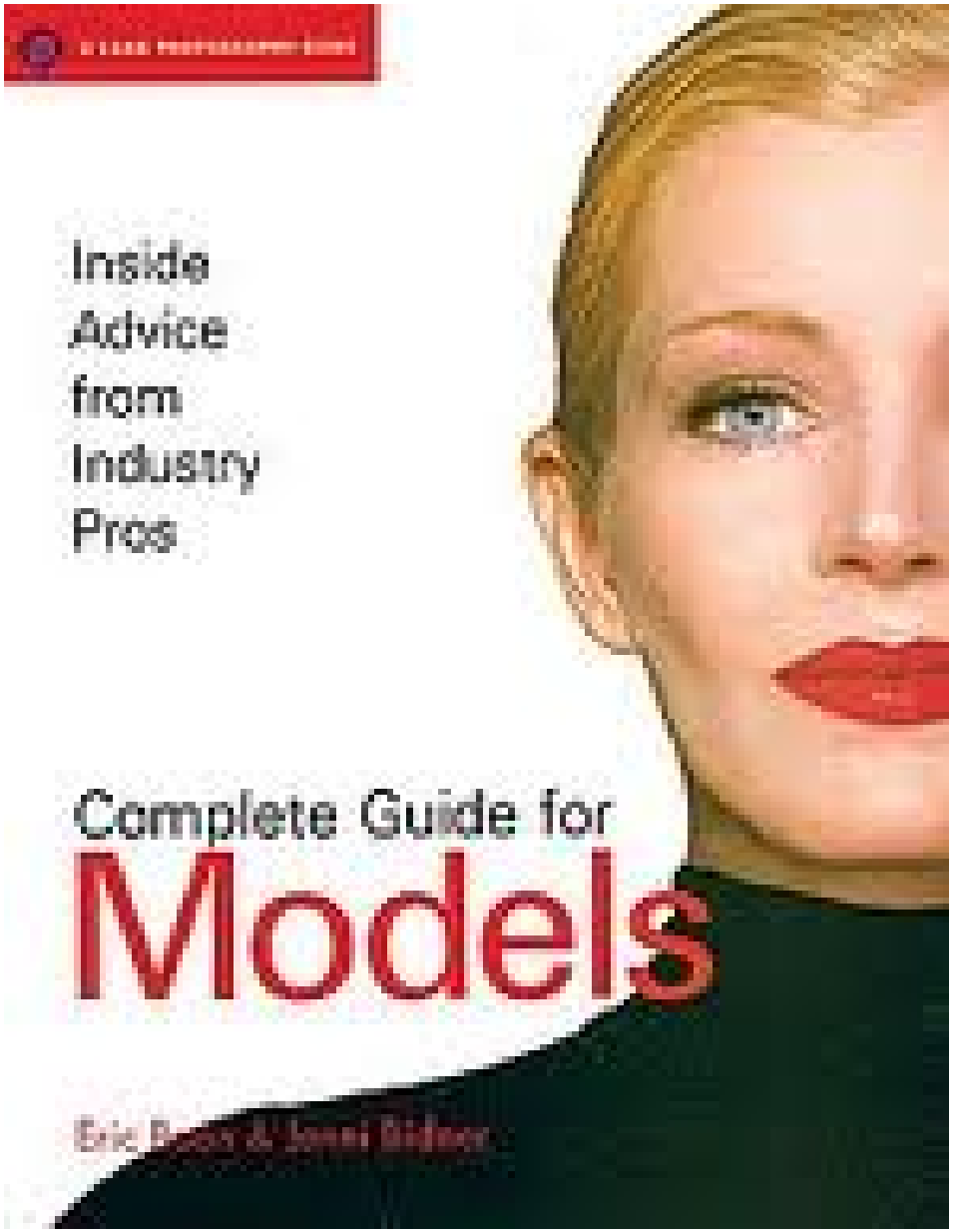
Τι μπορούν να πουν τα μοντέλα;

Ω Μένανδρε και βίε
πότερος αρ΄ υμών
πότερος απεμιμήσατο

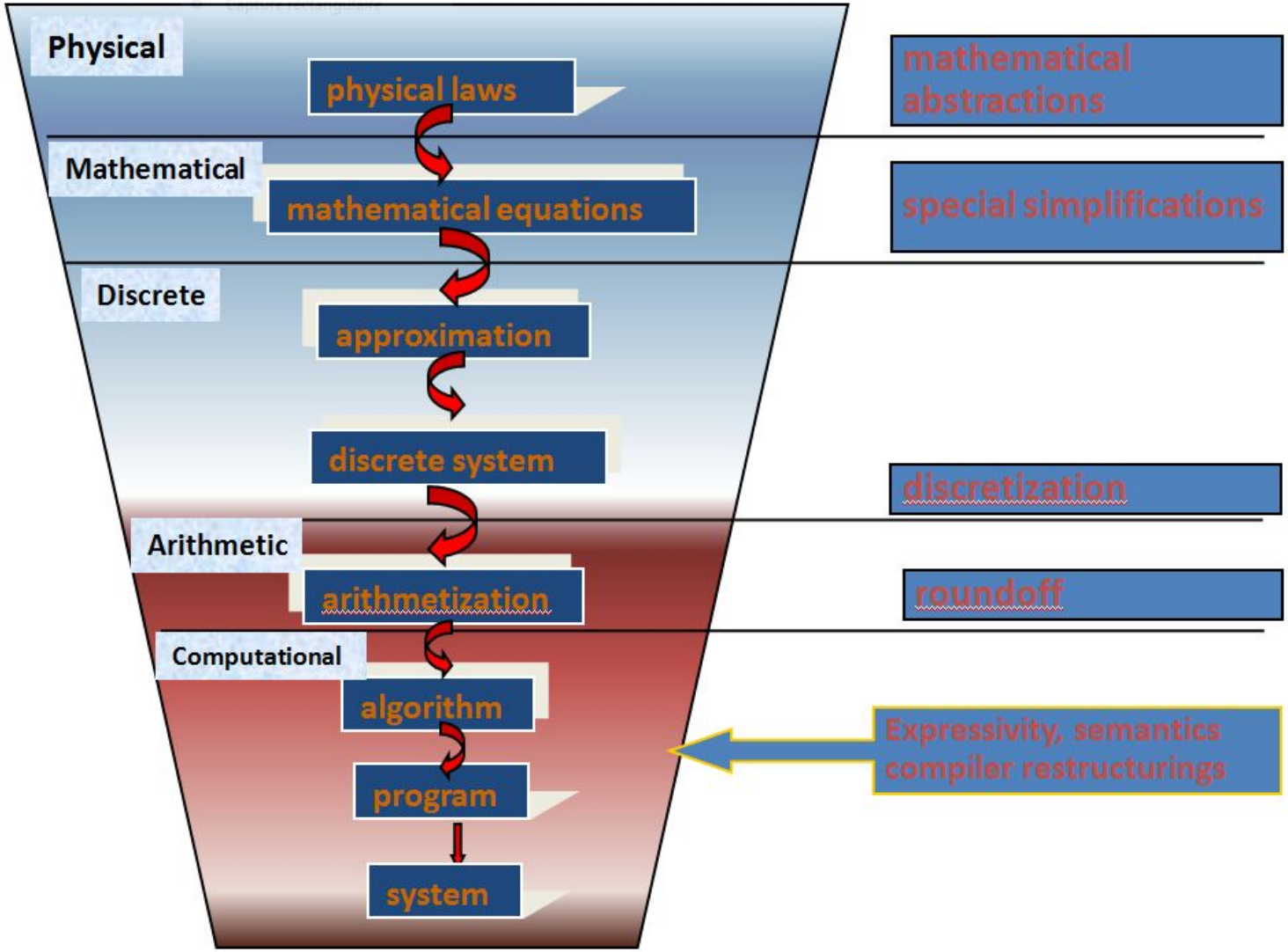


Τι μπορούν να πουν τα μοντέλα;

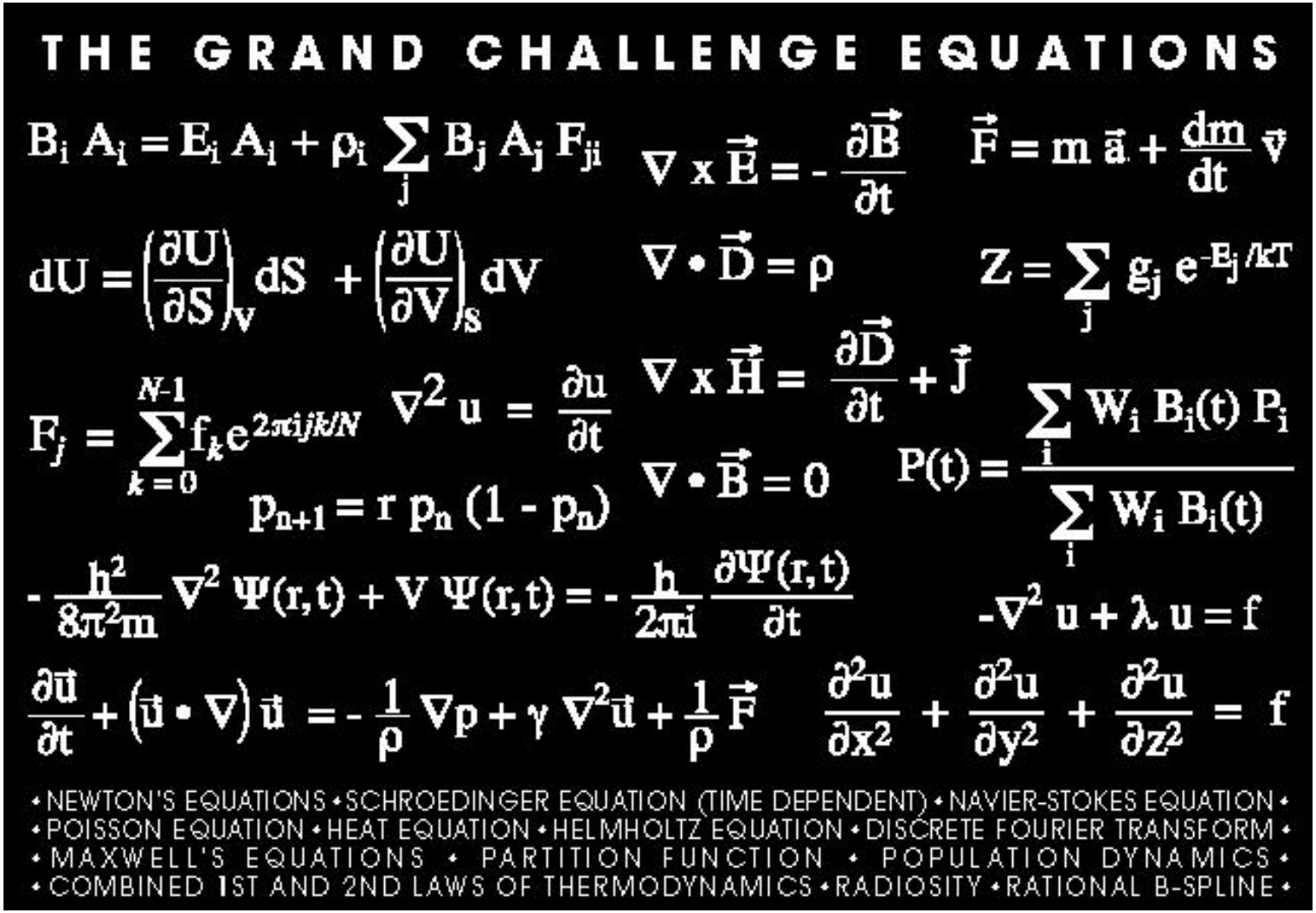
- Φυσικό
- Μαθηματικό
- Διακριτό
- Αριθμητικό
- Υπολογιστικό



Μοντέλα: Διαδρομές και Απώλεια Πληροφορίας



Μαθηματικά μοντέλα



Σχετικά με τα Μαθηματικά

Υπενθυμίζουμε:

``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...''

(θα έχετε ακούσει για BIG DATA!)

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.

ΔΥΣΚΟΛΙΑ/ΠΡΟΚΛΗΣΗ: **Ο ΙΛΙΓΓΟΣ** της διαδρομής

ΔΥΣΚΟΛΙΑ/ΠΡΟΚΛΗΣΗ: **Ο ΙΛΙΓΓΟΣ** της διαδρομής

Η διαδρομή και ο στόχος

- Στον ΕΥ συνήθως πλοηγούμε μεταξύ του Διακριτού, του Αριθμητικού και του Υπολογιστικού μοντέλου.
- Τα μοντέλα βοηθούν να κάνουμε προβλέψεις σχετικά με την ταχύτητα και την ακρίβεια των υπολογισμών,
- ... να προσαρμόσουμε τις μεθόδους και τα εργαλεία μας
- ... ώστε να βελτιώσουμε τη συνολική επίδοση.

Η διαδρομή και ο στόχος

- Στον ΕΥ συνήθως πλοηγούμε μεταξύ του Διακριτού, του Αριθμητικού και του Υπολογιστικού μοντέλου.
- Τα μοντέλα βοηθούν να κάνουμε προβλέψεις σχετικά με την ταχύτητα και την ακρίβεια των υπολογισμών,
- ... να προσαρμόσουμε τις μεθόδους και τα εργαλεία μας
- ... ώστε να βελτιώσουμε τη συνολική επίδοση.

Κριτήρια

- ταχύτητα ... να φτάσουμε όσο γίνεται πιο γρήγορα
- ακρίβεια ... χωρίς ατύχημα
- κόστος ... εντός προϋπολογισμού
- ενέργεια ... να είμαστε «πράσινοι»
- προιόν; ... και χρήσιμοι!

Ερωτήματα

- πόσο γρήγορα επιτυγχάνεται η λύση;
  - $\rightarrow$ υπολογιστική πολυπλοκότητα και μεταφορές
  - $\rightarrow$ απόδοση των πόρων και αποτελεσματική χρήση τους
- πόσο ακριβή είναι τα αποτελέσματα;
  - $\rightarrow$ 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;

Βιβλιογραφία I

G. Golub and J.M. Ortega.
Scientific Computing: An Introduction with Parallel Computing.
Academic Press, Inc., San Diego, CA, 1993.

B. Lucquin and O. Pironneau.
Introduction to Scientific Computing.
Wiley, Cichester, 1998.

Ε. Γαλλόπουλος.
Επιστημονικός Υπολογισμός Ι.
Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. http://computationalsciencesolutions.com/docs/SR03S10.15.2010.pdf (βλ. σελ 11)
2. http://cmcs.epfl.ch/projects/alinghi (βλ. σελ 12)
3. http://new.alinghi.com/ (βλ. σελ 12)
4. http://news.bbc.co.uk/2/hi/technology/7021869.stm (βλ. σελ 13)
5. http://www.scientific-computing.com/news/news_story.php?news_id=2268 (βλ. σελ 14)
6. http://www.nobelprize.org/ (βλ. σελ 14)
7. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced-chemistryprize2013.pdf (βλ. σελ 15-16)
8. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-1-4613-8185-3_41#page-1 (βλ. σελ 17)
9. http://ecx.images-amazon.com/images/I/31O4npynUuL._AA115_.jpg (βλ. σελ 17)
10. https://c2.staticflickr.com/8/7039/6880176047_1c05efed18_b.jpg (βλ. σελ 18)
11. http://innovate.ucsb.edu/wp-content/uploads/2010/02/babbage.jpg (βλ. σελ 19)
12. http://arxiv.org/abs/0709.4024 (βλ. σελ 21)
13. https://www.ima.umn.edu/ arnold/disasters/patriot.jpg (βλ. σελ 23)
14. https://www.ima.umn.edu/ arnold/disasters/ariane.jpg (βλ. σελ 23)
15. http://www.ima.umn.edu/ arnold//disasters/sleipner.gif (βλ. σελ 23)
16. https://www.spec.org/cpu2006/publications/CPU2006benchmarks.pdf (βλ. σελ 24-25)
17. http://ecx.images-amazon.com/images/I/41QaefwoZqL._SY344_BO1,204,203,200_.jpg (βλ. σελ 27)

Χρήση Έργου Τρίτων II

18. http://www.rug.nl/science-and-society/centre-for-information-technology/research/hpcv/vr_visualisation/simulation/titanic/grand_challenge.gif (βλ. σελ 29)
19. http://www.dartmouth.edu/ matc/MathDrama/reading/Wigner.html (βλ. σελ 30)
20. http://static.googleusercontent.com/external_content/untrusted_dlcp/research.google.com/en//pubs/archive/35179.pdf (βλ. σελ 31)
21. http://www.shipulski.com/wp-content/uploads/2012/02/monks_roller_coaster.jpg (βλ. σελ 32-33)
22. http://www.prayingthegospels.com/wp-content/uploads/2014/02/roller-coaster-24.jpg (βλ. σελ 33)

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών - Ευστράτιος Γαλλόπουλος 2015

``Επιστημονικός Υπολογισμός Ι'', Έκδοση: 1.0, Πάτρα 2013-2014.

Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/CEID1096/

Τέλος Ενότητας

BY NC ND

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης