

Computational Science, en tredje vei for forskning

Petter E. Bjørstad

Para//ab, Institutt for Informatikk,

Email: petter@ii.uib.no, <http://www.ii.uib.no/~petter/>.

Denne artikkelen kan også leses på
<http://www.ii.uib.no/~petter/reports/qed97.pdf.gz>

November 5, 1997

Hei !, På denne siden skal jeg gi deg endel fakta om raske datamaskiner og om hvordan dagens regnemaskiner brukes til forskning på Mat-Nat. Dersom dette virker interessant håper jeg å se deg på noen av de kursene vi gir og aller helst som student når hovedfaget skal velges.

Den elektroniske regnemaskinen er ikke stort eldre enn meg, omlag 50 år er et bra anslag. Like etter krigen ble de første bygget basert på radiorør, de ble svært store og hver gang det gikk et radiorør måtte hele maskinen repareres. I 1948 gjorde tre forskere på Bell laboratoriet i New Jersey en stor oppdagelse, transistoren, som kunne erstatte radiorøret. Man hadde funnet en måte å lage avansert elektronikk direkte i materialet silisium. Bardeen, Brattain og Shockley som forskerne het, fikk Nobelprisen i 1956 da det gikk opp for verden hvilken betydning denne oppdagelsen etter hvert skulle få.

Det ble snart klart at man kunne lage disse transistorene veldig små, ja dersom man laget alle dimensjoner halvparten så store, fikk man plass til fire ganger så mange transistorer på det samme arealet. På syttitallet kom mikroprosessen, en hel liten regnemaskin på en chip, så liten som en fingernegl. Siden da har utviklingen fulgt den såkalte Moore's lov, datamaskiner blir dobbelt så raske hver 18. måned. (En datamaskin som er halvannet år gammel vil bare ha halvparten av den kapasiteten du kan kjøpe til samme pris idag.)

Datamaskinen har altså utviklet seg eksponensielt, det er ikke mange eksempler på dette i andre sektorer. Brukt som et vitenskapelig verktøy har vi derfor situasjonen at forskeren må forholde seg til et redskap hvis muligheter forbedres eksponensielt over tid. Dette betyr at problemer som synes aldeles uløselige for bare få år siden kan angripes idag. Tilsvarende kan oppgaver som idag synes utenfor rekkevidde, antagelig løses om noen ganske få år. Denne trenden er slett ikke problemfri. Alle som har skrevet datamaskinprogrammer vet at dette er en arbeidsintensiv og ofte frustrerende prosess. Et program bør derfor helst fungere på flere generasjoner av datamaskiner. Dette setter imidlertid store krav til forskeren, det er ikke lett for oss å ta høyde for den raske utviklingen ved utformingen av et veldig konkret program for en (som oftest)

svært konkret oppgave.

For å nå stadig høyere ytelse har også datamaskinen forandret seg betydelig. Dette skaper problemer fordi forskerne gjerne forsøker å tilpasse programmene sine slik at de skal kunne utføres hurtigst mulig på maskinen. I mange år var de raskeste datamaskinene såkalte vektormaskiner. Vektormaskinene fungerte best dersom de kunne operere på lange sekvenser av tall (såkalte vektorer). De hadde også den egenskapen at en slik vektor som kunne være lagret over et stort adresseområde i maskinens hukommelse, likevel lot seg overføre til regneenhetene like fort som beregningene kunne utføres.

Idag, har de raske mikroprosessorene som man finner i PC'er og arbeidsstasjoner, blitt så hurtige at det er best økonomi og bruke dem også til å lage superdatamaskiner. Imidlertid kan disse prosessorene bare regne effektivt på data som befinner seg i et hurtigminne (eller cache som vi gjerne sier). Lange vektorer er da ofte u hensiktsmessige, små blokker av tall er meget bedre. Dermed har situasjonen oppstått at program som i sin tid ble spesialsydd for å fungere effektivt, nå er blant de største sinkene på dagens maskiner.

For å gjøre situasjonen enda mer innviklet for den stakkars forskeren (som egentlig bare er interessert i å bruke et verktøy i sin naturvitenskapelige forskning) har datamaskinene også blitt parallelle. Dette betyr at regneoppgaven må organiseres på en helt annen måte enn før. Jo flere prosessorer en ønsker å bruke dess mer innviklet kan dette lett bli. Oppgaven er temmelig analog med den å sette mange studenter til å løse en oppgave i fellesskap istedenfor at hver student løser hver sin oppgave. Dersom det tar en mann en time å grave en grøft så er det slett ikke sikkert at ti mann graver den samme grøften på seks minutter. De kan for eksempel tenkes å bruke de første ti minuttene til å diskutere hvorledes de skal dele på jobben. Slik kommunikasjon og "møtevirksomhet" blant parallelle prosessorer i en datamaskin senker effektiviteten akkurat på samme måte.

Til tross for alle vansker er det likevel slik at datamaskinen idag har etablert en "tredje vei" for naturvitenskapelig forskning. Tradisjonelt har fremskritt kommet som et resultat av en fruktbar vekselvirkning mellom teori og eksperiment. Man observerer et fenomen som deretter forklares via teori eller utvikler teori som i sin tur verifiseres gjennom eksperiment. Datamaskinen kan brukes som en bro mellom disse tilnærmingene. Det er ofte enklere å utføre millioner av ulike "eksperiment" i form av simuleringer på en superdatamaskin enn å sette opp et enkelt tradisjonelt eksperiment i et laboratorium. Men datamaskinen kan ikke sies å erstatte eksperimentet, ofte vil en på grunnlag av simuleringer få et bedre grunnlag for å bestemme nøyaktig hvilket eksperiment som bør gjennomføres i laboratoriet. Tilsvarende kan man fra teorisiden bruke datamaskinen til å teste hypoteser og mulige teoretiske modeller direkte. Det er igjen slik at maskinen eliminerer uinteressante modeller og dermed avgrenser problemområdet og kanskje bidrar til å fokusere forskerens tanker i riktig retning.

Universitetet i Bergen har idag en superdatamaskin levert av selskapet Silicon Graphics som heter Origin 2000. Den kan utføre opptil 50 milliarder regneoperasjoner hvert sekund og den har en hukommelse på hele 25.000 megabytes (PC'en blir liten i dette selskapet). Maskinen brukes primært til naturvitenskapelig forskning i hele Norge og er blant de aller kraftigste i Skandinavia. Dersom du har lyst til å finne litt mer informasjon om datamaskinen kan du kikke på <http://www.parallab.uib.no/resources/origin/> for vårt lokale anlegg og <http://www.sgi.com/Products/hardware/servers/technology/overview.html>

for ren teknisk informasjon. Jeg skal kort nevne noen aktuelle områder hvor en slik maskin betyr forskjellen mellom å få jobben gjort eller erkjennelse av at oppgaven er "umulig".

Analyse av konstruksjoner for å sikre at de ikke bryter sammen er et av de første områdene hvor bruk av matematiske modeller og avansert regnekraft demonstrerte ny metodikk. Bildet på denne siden viser en enkel regnemaskinmodell av et rørknutepunkt. Disse forekommer for eksempel i oljeplattformer og en nøyaktig analyse av slike er viktig for hele konstruksjonen. I 1983 kunne en slik beregning ta 2-3 dager, mens den samme beregningen idag går unna på noen sekunder. Dette betyr at man idag kan studere tusenvis av mulige konstruksjoner for å komme frem til den aller beste, mens man tidligere kun brukte datamaskinen for å sjekke at det man hadde tegnet var godt nok. Etterhvert som avanserte konstruksjoner blir beregnet med datamaskin øker også ansvaret for at dataprogrammene og datamodellene både er riktige og blir brukt på rett måte. Da Sleipner plattformen sank ved Stavanger for noen år siden ble noe av årsaken ført tilbake til en datamodell som ikke var laget nøyaktig nok. Denne unøyaktigheten var en av flere faktorer som førte til tap i milliardklassen.

Frøde Flatøy ved Geofysisk Institutt jobber med forskning på kjemisk forurensning i atmosfæren. Dette prosjektet som har partnere over store deler av Europa, bruker Origin maskinen til å beregne prognoser for forurensning. Dette gjøres flere ganger daglig og avhenger i sin tur av værvarsel for Europa som utarbeides ved det europeiske værsenteret i England (med bruk av superdatamaskiner der). For at alle interesserte forskere fra hele Europa skal kunne dra nytte av disse beregningene blir resultatene automatisk lagt ut på Internettet. Du kan sjekke de opp selv (og lære mer om dette) ved å tittle på <http://ask.ii.uib.no/~climate/>. Det er mange andre utfordringer innen geofysikk, et nasjonalt forskningsprogram for å studere regionalt klima ventes å bli en stor bruker ganske snart.

Ved matematisk institutt bruker man Origin maskinen til å simulere næringskjeder i Norskehavet og optimal produksjon av oljereservoarer for å nevne to ganske ulike tema. Anvendt matematikk er et vel etablert fag som idag blir sterkt påvirket av utviklingen av stadig raskere datamaskiner som kan finne numeriske tilnærminger der analytiske metoder må gi tapt.

Kjemikerne regner snart mer enn de står i laboratoriet. Det finnes et stort antall avanserte programmer som gjør det mulig å regne på kjemiske reaksjoner. Her i Bergen studeres blant annet bruk av katalysatorer i kjemien på denne måten. Kjemisk er faktisk det faget på Mat. Nat. som regner aller mest og slik er det ved de andre universitetene også. Interesserte kan ta en titt på <http://www.parallab.uib.no/resources/origin/chem/> for å finne flere opplysninger om hva som finnes tilgjengelig idag.

I 1986 vakte det betydelig oppsikt at forskeren Michael Rossman hadde klart å identifisere den komplette (atomære) strukturen til det viruset som gir oss forkjølelse. Dette var mulig fordi datamaskinen omsider hadde mulighet til å regne på matriseproblemer med mer enn en million ukjente. Viruset består av mange hundre tusen atomer og den matematiske formuleringen hadde omlag tre ganger så mange ukjente. Idag er det fremdeles en viktig oppgave å bestemme strukturen til ulike virus da dette kan føre til utvikling av vaksiner. De siste ti år har det skjedd en enorm utvikling på bruk av datamaskiner innen bioteknologi. I Bergen burde vi bli mye flinkere til å bruke dette verktøyet innen marin bioteknologi, et felt universitetet ønsker å satse på.

I Bergen foregår det også mye interessant bruk av Origin ved Havforskningsinstituttet og ved Nansensenteret. (Ta en titt på <http://www.imr.no/> og <http://www.nrsc.no:8001/> dersom du vil vite mer.) Det er selvfølgelig ikke tilfeldig at mange marine forskergrupper i Bergen har vært flinke til å ta det nye forskningsverktøyet i bruk. Marine fag er et satsingsområde i Bergen og dersom man skal hevde seg i internasjonal forskning må en kjenne til hvilke områder en avansert datamaskin kan hjelpe til å utvikle kunnskap på. Mange naturvitenskaper har studert problemer og prosesser som har vært så komplekse at en kvalitativ tilnærming har vært den eneste farbare vei. Superdatamaskiner kan være med å endre dette, med stadig større kapasitet til å gi oss et realistisk bilde av komplekse systemer kan mer kvantitativ kunnskap etableres.

Det kanskje mest spennende ved et slikt "regnelaboratorium" er at det bringer ulike naturvitenskapelige fagmiljø sammen fordi de plutselig har fått et felles laboratorium i tillegg til de tradisjonelle som har blitt mer og mer instituttspesifikke. Nye anvendelser av massiv regnekapasitet i fag der dette ikke enda har tradisjon er en annen utvikling der enkeltforskerens evne til nytenking ofte er begrensningen. Unge forskere og studenter som har trening i bruk av regneverktøy kan endre metode og tilnærming i mange disipliner. Medisin og økonomi er fagfelt som enda ikke har "våknet helt" i denne sammenhengen her i Bergen. I utlandet har vi allerede eksempler på hvordan betydelig datakraft brukes for å vurdere hvilke varer i supermarkedet som bør plasseres sammen for å påvirke ditt og mitt handlemønster. Skal vi ha innflytelse på hvordan morgendagen blir er det iallefall kjekt å kjenne teknologiens muligheter på godt og vondt. Plutselig har fagfolk i ulike disipliner fått behov for en ny, felles komponent av kunnskap; hvordan kan jeg bruke "regnelaboratoriet" best mulig i min forskning?

Utdanningen av fagfolk som effektivt kan utnytte avansert regneverktøy har enda ikke fått helt faste former. Tradisjonell numerisk analyse er ikke svaret, selv om kunnskap om dette emnet i moderne form er viktig. En generell IT-utdanning er heller ikke nok selv om denne også inneholder viktige komponenter som forskere og teknologer må ta med seg i morgendagens samfunn. Anvendt matematikk og matematisk modellering er også viktig, men uten gode kunnskaper om algoritmer og avanserte dataprogrammer er en ikke i mål.

Ved Universitetet i Bergen har vi både forskere og utstyr for å lage Norges beste utdanning innen "Computational Science". Jeg tror vi nokså snart vil kunne gi studenter ved Mat. Nat. et enda bedre tilbud enn idag. Dette er et fagfelt med voksende betydning, det er tverrfaglig og det trenger motiverte studenter med interesse for naturvitenskap og teknologi, litt ekstra tyngde i matematikk er heller ikke noen ulempe.