

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΜΟΡΙΑ, ΥΛΙΚΑ, ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

ΔΙΔΑΣΚΟΝΤΕΣ: Μαρία Κανακίδου, Σταύρος Φαράντος, Γιώργος
Φρουδάκης

ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- “Introduction to Computational Chemistry”
Frank Jensen, 1999, Wiley
QD455.3-E4, J46
- Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια έως βιοπολυμερή
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός Σελίδων 700,
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models"
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- "Introduction to Computational Chemistry"
Frank Jensen, 1999, Wiley
QD455.3-E4, J46
- Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια έως βιοπολυμερή
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός Σελίδων 700,
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- “Introduction to Computational Chemistry”
Frank Jensen, 1999, Wiley
QD455.3-E4, J46
- Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια έως βιοπολυμερή
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός Σελίδων 700,
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (HTC)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης : High Performance Computing (HPC)
 - Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης : Supercomputers
 - Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης : Quantum Computing
- Κβαντικοί Υπολογιστές : Qbits and Quantum Computers

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (HTC)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- **Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης** : High Performance Computing (HPC)
 - Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης
 - Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης
- **Κβαντικοί Υπολογιστές** : Qbits and Quantum Computers

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (HTC)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- **Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης** : High Performance Computing (HPC)
 - με CPUs (Central Processing Units)
 - με GPUs (Graphics Processing Units)
- **Κβαντικοί Υπολογιστές** : Qbits and Quantum Computers

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (**HTC**)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- **Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης** : High Performance Computing (**HPC**)
 - με CPUs (Central Processing Units)
 - με GPUs (Graphics Processing Units)
- **Κβαντικοί Υπολογιστές** : Qbits and Quantum Computers

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (**HTC**)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- **Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης** : High Performance Computing (**HPC**)
 - με CPUs (Central Processing Units)
 - με GPUs (Graphics Processing Units)
- **Κβαντικοί Υπολογιστές** : Qbits and Quantum Computers

Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες

- **Υπολογιστές Μεγάλης Εισαγωγής Δεδομένων** : High Throughput Computing (**HTC**)
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Grid Computing
 - Κατανεμημένοι Υπολογιστές : Cloud Computing
- **Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης** : High Performance Computing (**HPC**)
 - με CPUs (Central Processing Units)
 - με GPUs (Graphics Processing Units)
- **Κβαντικοί Υπολογιστές** : Qbits and Quantum Computers

Τι είναι τα Grids

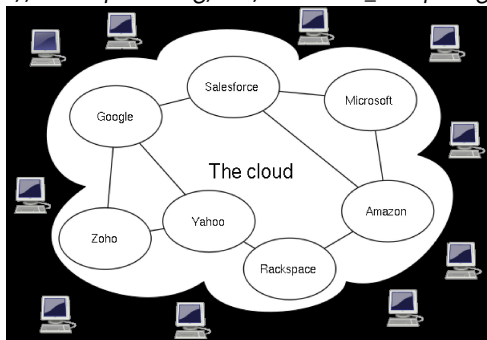
Οι υπολογιστές Πλέγματος είναι γεωγραφικά κατανεμημένοι προσωπικοί Η/Υ, υπέρ-υπολογιστές ή συστάδες Η/Υ που συνδέονται με το κοινό διαδίκτυο (*Internet*), κάτω από το ίδιο λειτουργικό σύστημα (*Middleware*), με αποτέλεσμα ο χρήστης να εργάζεται όπως στον προσωπικό του υπολογιστή ή σε μια τοπική συστάδα υπολογιστών. Τα δεδομένα μπορούν να αποθηκεύονται και να διακινούνται σε όλο τον πλανήτη (όπως και κάθε πληροφορία στο Διαδίκτυο), οι εργασίες να εκτελούνται σε απομακρυσμένους / ετερογενείς Η/Υ και ομάδες χρηστών να συσκέπτονται και εργάζονται σαν να βρίσκονται στον ίδιο χώρο.

Τι είναι το Cloud computing

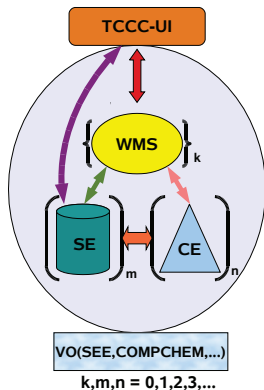
Cloud Computing είναι Υπολογιστές Πλέγματος αλλά εφοδιασμένοι με Λογισμικό τέτοιο ώστε να είναι προσανατολισμένο για προσφορά υπηρεσιών.

Δες

http://en.wikipedia.org/wiki/File:Cloud_computing.svg



Η δομή του Grid



WMS : Workload Management System **SE** : Storing Element
CE : Computing Element **VO** : Virtual Organisation

Μειονεκτήματα του Grid

- Ανομοιογενές hardware,
- αργό δίκτυο,
- περιορισμένος έλεγχος του Computing Element (CE),
- περιορισμένος χρόνος για την εκτέλεση των υπολογισμών,
- περιορισμός στο μέγεθος των δεδομένων που μεταφέρονται στο δίκτυο των WMS or CE,
- περιορισμοί στην παραλληλοποίηση των προγραμμάτων με MPI.

Μειονεκτήματα του Grid

- Ανομοιογενές hardware,
- αργό δίκτυο,
- περιορισμένος έλεγχος του Computing Element (CE),
- περιορισμένος χρόνος για την εκτέλεση των υπολογισμών,
- περιορισμός στο μέγεθος των δεδομένων που μεταφέρονται στο δίκτυο των WMS or CE,
- περιορισμοί στην παραλληλοποίηση των προγραμμάτων με MPI.

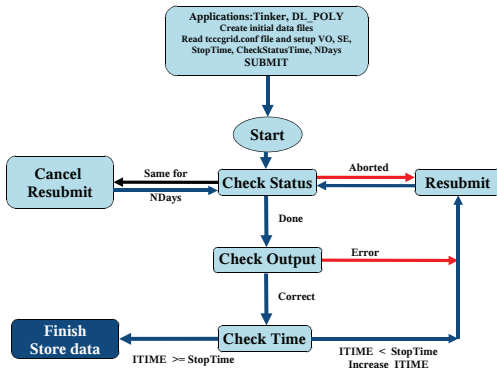
Μειονεκτήματα του Grid

- Ανομοιογενές hardware,
- αργό δίκτυο,
- περιορισμένος έλεγχος του Computing Element (CE),
- περιορισμένος χρόνος για την εκτέλεση των υπολογισμών,
- περιορισμός στο μέγεθος των δεδομένων που μεταφέρονται στο δίκτυο των WMS or CE,
- περιορισμοί στην παραλληλοποίηση των προγραμμάτων με MPI.

Μειονεκτήματα του Grid

- Ανομοιογενές hardware,
- αργό δίκτυο,
- περιορισμένος έλεγχος του Computing Element (CE),
- περιορισμένος χρόνος για την εκτέλεση των υπολογισμών,
- περιορισμός στο μέγεθος των δεδομένων που μεταφέρονται στο δίκτυο των WMS or CE,
- περιορισμοί στην παραλληλοποίηση των προγραμμάτων με MPI.

Λογικό Διάγραμμα για την εκτέλεση προγραμμάτων στο Πλέγμα Η/Υ (Grid)



SEE-COMP-CHEM VOs usage

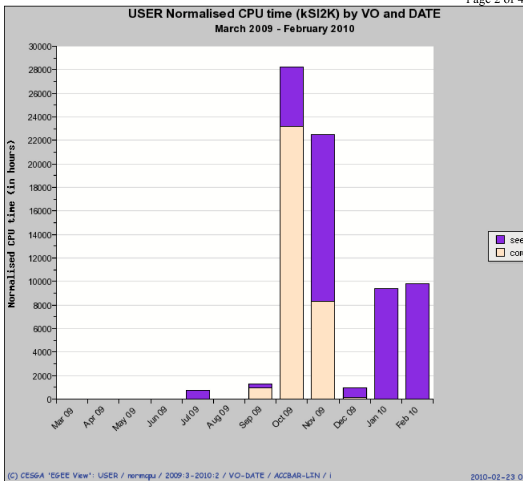
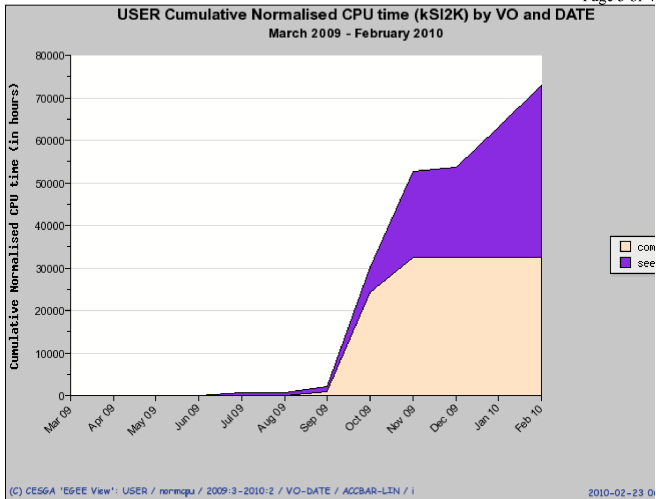


Chart showing the Cumulative Normalised CPU time (kSI2K) grouped by VO and DATE.
https://www3.egce.cesga.es/gridsite/accounting/CEGA/user/user_view.php 23/2/2010

SEE-COMP-CHEM VOs usage



Pie Chart showing the share in Normalised CPU time (kSI2K) per DATE.

USER Normalised CPU time (kSI2K) per DATE

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Υπολογιστές Υψηλής Απόδοσης

<http://en.wikipedia.org/wiki/TOP500>

- 2020 Fujitsu Fugaku 415,530.0 (TFlops/s) Kobe, Japan
- 2018 IBM Summit 148,600.0 (TFlops/s) Oak Ridge, U.S.
- 2018 IBM/Nvidia/Mellanox Sierra 94,640.0 (TFlops/s) Livermore, U.S.
- 2016 Sunway TaihuLight 93,014.6 (TFlops/s) Wuxi, China
- 2013 NUDT Tianhe-2 61,444.5 (TFlops/s) Guangzhou, China
- 2019 Dell Frontera 23,516.4 (TFlops/s) Austin, U.S.
- 2012 Cray/HPE Piz Daint 21,230.0 (TFlops/s) Lugano, Switzerland
- 2015 Cray/HPE Trinity 20,158.7 (TFlops/s) New Mexico, U.S.
- 2018 Fujitsu ABCI 19,880.0 (TFlops/s) Tokyo, Japan
- 2018 Lenovo SuperMUC-NG 19,476.6 (TFlops/s) Garching, Germany

Διαφορές μεταξύ CPUs / GPUs

- **Central Processing Unit (CPU)** : Διαδοχικές πράξεις - μία εντολή για κάθε δεδομένο (SISD)
- **Graphic Processing Unit (GPU)** : Παράλληλες πράξεις - μία εντολή ταυτόχρονα για πολλά δεδομένα (SIMD)
- Επίσης δεξ :
NVIDIA : TeslaC2050-Fermi-Performance.pdf,
PGI : PGI_GPU_FORTRAN.pdf

Διαφορές μεταξύ CPUs / GPUs

- **Central Processing Unit (CPU)** : Διαδοχικές πράξεις - μία εντολή για κάθε δεδομένο (SISD)
- **Graphic Processing Unit (GPU)** : Παράλληλες πράξεις - μία εντολή ταυτόχρονα για πολλά δεδομένα(SIMD)
- Επίσης δες :
 - NVIDIA : [TeslaC2050-Fermi-Performance.pdf](#),
 - PGI : [PGI_GPU_FORTRAN.pdf](#)

Διαφορές μεταξύ CPUs / GPUs

- **Central Processing Unit (CPU)** : Διαδοχικές πράξεις - μία εντολή για κάθε δεδομένο (SISD)
- **Graphic Processing Unit (GPU)** : Παράλληλες πράξεις - μία εντολή ταυτόχρονα για πολλά δεδομένα(SIMD)
- Επίσης δες :
NVIDIA : [TeslaC2050-Fermi-Performance.pdf](#),
PGI : [PGI_GPU_FORTRAN.pdf](#)

Λειτουργικά Συστήματα

- UNIX-LINUX: Debian, Ubuntu, Fedora, Suse, Linux Mint
Zorin OS, Elementary OS, Linux Lite, Manjaro Linux,
Pop!_OS, Peppermint OS, Deepin
- UNIX-LINUX: in most servers and
Google's Android, Chrome OS, and Chromium OS, also Mac OSX
- MICROSOFT: WINDOWS 10
- MAC: OS X
- GOOGLE: CHROME OS (CHROMEBOOK)

Γλώσσες Προγραμματισμού, Διάλεκτοι και Παραλληλισμός εντολών

- C, C++, FORTRAN, PYTHON
- MPI : Message Passing Interface
- Προγραμματισμός για GPUs
CUDA : Compute Unified Device Architecture (NVIDIA)
Επίσης δες : PGI : PGI_GPU_FORTRAN.pdf