

Open Source Scientific Computing

Kenneth Geisshirt
kenneth@geisshirt.dk

2. marts 2002

- Hvad er Scientific Computing?
- Hvorfor Open Source?
- Biblioteker
- Generelle værktøjer
- Applikationer

Hvad er Scientific Computing?

Scientific Computing handler om tekniske og videnskabelig beregninger, dvs. løsning af tekniske og videnskabelige problemer vha. en computer.

Scientific Computing anvendelse indenfor

kemi til beregning af molekylers struktur og reaktioners forløb

biologi til forudsigelse af proteiners struktur

medicin til at finde bruge "drug candidates"

geofysik til at finde nye oliefelter

meteorologi til at forudsige vejret og fremtidens klima

Hvorfor Open Source?

Den (natur)videnskabelige metodiks grundpille er, at en observation skal kunne efterføres af andre, før den accepteres. Derfor skal andre have adgang til

- metoden
- data

En observation er kun "sandfærdig" når den reproduceres af en anden med en anden metode!

Forskere idag benytter i stort omfang beregninger - fra regneark til kvantemekaniske programmer. Ved brug af Open Source sikrer de sig

- adgang til og fuld kontrol over metode
- mulighed for at opdage og rette fejl i metode

Påstand

Forskningsresultater, som er baseret på en eller anden beregning i et ikke-OS program, er upålidelige.

Biblioteker

Der findes mange biblioteker til numerisk analyse. Fortran-77 og C er stadig dominerende.

GNU Scientific Library er et meget omfattende bibliotek i C

<http://sources.redhat.com/gsl/>

Numerical Python er primært lineær algebra til Python

<http://www.pfdubois.com/numpy/>

Perl Data Language er et generelt numerisk bibliotek til

Perl

<http://pdl.perl.org/>

Blitz++ er et meget hurtigt vektorbibliotek i C++

<http://www.oonumerics.org/blitz/>

Goose er et statistik-bibliotek i C++

<http://www.gnu.org/software/goose/>

GiNaC er computeralgebra i C++

<http://www.ginac.de/>

Generelle værktøjer

Generelle værktøjer er type fortolkede programmeringssprog, som giver slutbrugeren et højere abstraktionsniveau at arbejde på.

GNU Octave er FSF's klon af Matlab

<http://www.octave.org>, <http://www.goctave.org>

R er en klon af S

<http://www.r-project.org/>

JACAL er et computeralgebra-system

<http://www-swiss.ai.mit.edu/~jaffer/JACAL.html>

Overflow er et dataflow-orienteret udviklingsværktøj

<http://freespeech.sourceforge.net/overflow.html>

Applikationer

Der findes en stor mængde applikationer til næsten ethvert fagområde.

Tochnog er et FEM-program

<http://tochnog.sourceforge.net/>

Ghemical er til molecular modeling

<http://www.uku.fi/~thassine/ghemical/>

gEDA er en simulator til elektriske kredsløb

<http://geda.seul.org/>