

Harri Hyytinen

**HELMITAUUSTA KVANTTIKONEESEEN-
LASKENTATEHON TARVE TIETEESSÄ**



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
INFORMAATIOTEKNOLOGIAN TIEDEKUNTA
2021

TIIVISTELMÄ

Tekijä, Hyytinen Harri

Helmitaulusta kvanttikoneeseen-laskentatehon tarve tieteessä

Jyväskylä: Jyväskylän yliopisto, 2021, 31s.

Tietojärjestelmätiede

Ohjaajat: Marttiin Pentti, Kyppö Jorma

Nykyään mallinnetaan useita eri asioita tietokoneilla, sekä pyritään simuloimaan olosuhteita keinotekoisesti. Tarkoituksena on saada mahdollista tietoa, sekä odotusarvoa etukäteen tulevasta. Useat eri tieteenalat, kuten lääketiede, avaruuteen liittyvä tutkimus, sään ja ilmaston ennustaminen, tarvitsevat tietoa mallintamisen kautta. Tämä on mahdollista suuren laskentatehon HPC, (high performance computing) myötä ja tällä säästetään alkuinvestointien jälkeen sekä aikaa että rahaa konkreettisella tasolla. Tutkielma on kirjallisuuskatsaus, jonka tavoitteena on käydä lävitse historiallisesti tietokoneiden laskentatehon tarvetta ja sovellusalueita. Myös teknisiä ratkaisuja on katselmoitu. Katsauksessa tutustutaan nykyisiin supertietokoneisiin, niiden käyttöön ja tarpeeseen, sekä käydään läpi tämänhetkistä tietoa kvanttietokoneista ja niiden kehityksestä. Lopuksi tutkitaan mallintamisen ja simuloimisen mahdollisuuksia konkreettisin esimerkein.

Asiasanat: Laskentateho, laskentatehon tekniikkaa, supertietokoneet sekä kvanttietokone ja mallintaminen sekä simulointi

ABSTRACT

Hyytinen, Harri

From abacus to quantum computers: the need of high-performance computing

Jyväskylä: University of Jyväskylä, 2021, 31pp.

Information Systems

Supervisors: Marttiin Pentti, Kyppö Jorma

Simulation is nowadays the way to get information before real implementation. Value of the futures implementation and presume is the idea. Many genres of science like medical science, space investigation and weather forecasting need a computation capacity. This is possible now because of the high-performance computing (HPC) that saves time and money because theoretic level models can be tested before real life implementations. Aim of this report is to go through the need of the HPC to present supporting technology including quantum computers. There are lot of articles and information about supercomputers and quantum computers but the applications of those are mentioned rarely. This report composes supercomputers, need of them and an underlying technology behind high-performance computing.

Keywords: Computing power, high-performance computing, supercomputer and quantum computer, modeling and simulation

KUVIOT

KUVIO 1 Numeroiden sukupuu	8
KUVIO 2 Tietokoneen toimintaperiaate.....	10
KUVIO 3 Ohjelmointisilmukka	11
KUVIO 4 Eurora arkkitehtuuri	17
KUVIO 5 Elektronien spinitilat.....	19
KUVIO 6 Neljän bitin kartta ja kvanttikubitin superpositio	20
KUVIO 7 Matemaattisen mallinnuksen vaiheet	21

TAULUKOT

TAULUKKO 1 Prosessorityypit	15
-----------------------------------	----

SISÄLLYS

TIIVISTELMÄ

ABSTRACT

KUVIOT

TAULUKOT

1	JOHDANTO.....	5
2	LASKEMISEN HISTORIAA	7
	2.1 Laskukoneet.....	9
	2.2 Tietokoneen toimintaperiaate	9
3	SUURTEHOLASKENTA	12
	3.1 Supertietokoneet	13
	3.2 Kvanttitietokone	18
4	MALLINTAMINEN	21
	4.1 Simulointi ja emulointi.....	22
	4.2 Esimerkkejä mallintamisesta.....	23
	4.2.1 Biotekniikka ja ympäristönsuojelu	23
	4.2.2 Energiatalouden tutkimus.....	23
	4.2.3 3D tulostus ja tuotesuunnittelu.....	24
	4.2.4 Kognitiotiede	24
	4.2.5 Kryptografia ja kryptaaminen	24
	4.2.6 Meteorologia.....	25
	4.2.7 Onnettomuuksien simuloiminen	25
5	YHTEENVETO	27
6	LÄHTEET	29

1 JOHDANTO

Laskenta ja matematiikka ovat kehittyneet aikojen alusta tarpeen mukaan. Kaupankäyntiin liittyvä laskentatoimi on kehittänyt merkintä- ja laskentatapoja varhaisesta sumerilaisesta nuolenpääkirjoituksesta tieteelliseen laskentaan. Laskennallisen matematiikan, mekaniikan sekä sähkötekniikan kautta on kehitetty myös tietoon liittyviä teknisiä laitteita, joilla nykypäivänä hallinnoidaan ja ohjataan maailmanlaajuisesti yhteiskuntien teknistä kehitystä. Lähes jokaisella länsimaiseen kulttuuriin osallistuvalla on jonkinlainen käsitys tietotekniikasta tai kytkös siihen. Henkilökohtaiset päätelaitteet eri muodoissa jopa hallitsevat joidenkin elämää, mutta joka tapauksessa niiden merkitys on kasvanut nykyisessä yhteiskuntakehityksessä. Tässä tutkielmassa keskitytään vähemmän julki-suudessa olleeseen suurteholaskentaan ja matemaattiseen mallinnukseen sekä näiden mahdollistavaan tekniikkaan.

Suurteholaskentaan liittyvä tekniikka, high performance computing (HPC), on mahdollistanut erilaisen matemaattisen mallintamisen ja erilaisten käyttökohteiden testaamisen teoriassa ja virtuaalisesti, jolloin voidaan ennakoida tiettyjä prosesseja matemaattisesti ja teoriassa ennen kuin varsinaisia käytännön kokeita tehdään. Tietokoneiden, ohjelmistojen ja informaatioteknologian nopea kehitys on myös vahvistanut laskennallisen teknologian ja matemaattisen mallinnuksen merkitystä ja alan osaamisen tarve on kasvamassa. Mallinnuksen, teollisuusmatematiikan ja laskennallisen teknologian asiantuntijoita tarvitaan tulevaisuudessa lisääntyvässä määrin. Yliopistojen haaste on koulutusohjelmien kehittäminen ja ajanmukaistaminen. (Pohjolainen, 2010). Opetus- ja kulttuuriministeriö käynnisti yhdessä tutkimus- ja innovaatio toimijoiden kanssa vuosien 2017–2021 aikana datanhallinnan ja laskennan tutkimusinfrastruktuurien, palveluiden ja osaamisen kehittämisohjelman (DL2021). Kehittämisohjelman puitteissa myönnettiin 33 miljoonan euron rahoitus uuden laskenta- ja datanhallintaympäristön hankkimiseksi, minkä lisäksi valtion lisätalousarviosta tuli neljä miljoonaa euroa tekoälylaitteistojen kehittämiseksi. (Alftan&Enkovaara, 2019).

Suurteholaskenta on laskennallisesti erittäin vaativaa laskentaa, joka vaatii useampia prosessoreita tietokoneessa, sekä laajennettua muistikapasiteettiä tai vastaavasti hajautettua järjestelmää. Täysin uutta teknologiaa ovat kvanttietokoneet, joiden laskentakapasiteetti on mahdollisesti moninkertainen nyt jo tehokkaisiin supertietokoneisiin. Nykyaikaista tieteellistä kehitystä ohjaa yhä enemmän laskenta, ja suurteholaskennan järjestelmät ovat isossa roolissa ja instrumentteina tutkittaessa muun muassa maailmankaikkeuden alkuräjähdyksestä alkaen teollisuuden ja liike-elämän käytännön sovelluksiin. Myös lääketieteellinen tutkimus on erittäin tärkeää ihmisen olemassaolon kannalta. Useat eri sairaudet on saatu hallintaan esimerkiksi lääkkeiden ja rokotteiden avulla. Matemaattinen työ, esimerkiksi teollisuuden ja muiden kehitystehtävien parissa, on ryhmätyötä. Menestystarinoita syntyy, kun eri asiantuntijat onnistuvat yhdistämään tietämyksensä ja näkemyksensä toisiaan vahvistavalla tavalla niin sanotusti poikkitieteellisesti. Ryhmätyössä kommunikaatiotaidot ovat keskei-

sessä roolissa ja niitäkin oppii kokemuksen kautta. Matemaatikon kannattaa olla utelias ja suhtautua avoimesti eri tiedon aloja kohtaan ja opetella soveltamiskohteen toimialaa sisältäpäin. (Pohjolainen, 2010)

Tutkimus toteutetaan kuvailevana kirjallisuuskatsauksena. Kirjallisuushaut tehdään keskeisiin tietojenkäsittelyn ja tietojärjestelmätieteen elektronisiin julkaisukokoelmiin JykDok, Google Scholar sekä vanhempia kirjallisuuden lähteitä käyttäen. Ensimmäisessä vaiheessa tutkitaan numeroiden ja matematiikan kehitystä. Seuraavaksi käydään läpi teknisiä ratkaisuja. Kolmas vaihe on tutustuminen matemaattisen mallinnuksen esimerkkeihin. Tässä tutkimuksessa tul- laan selvittämään:

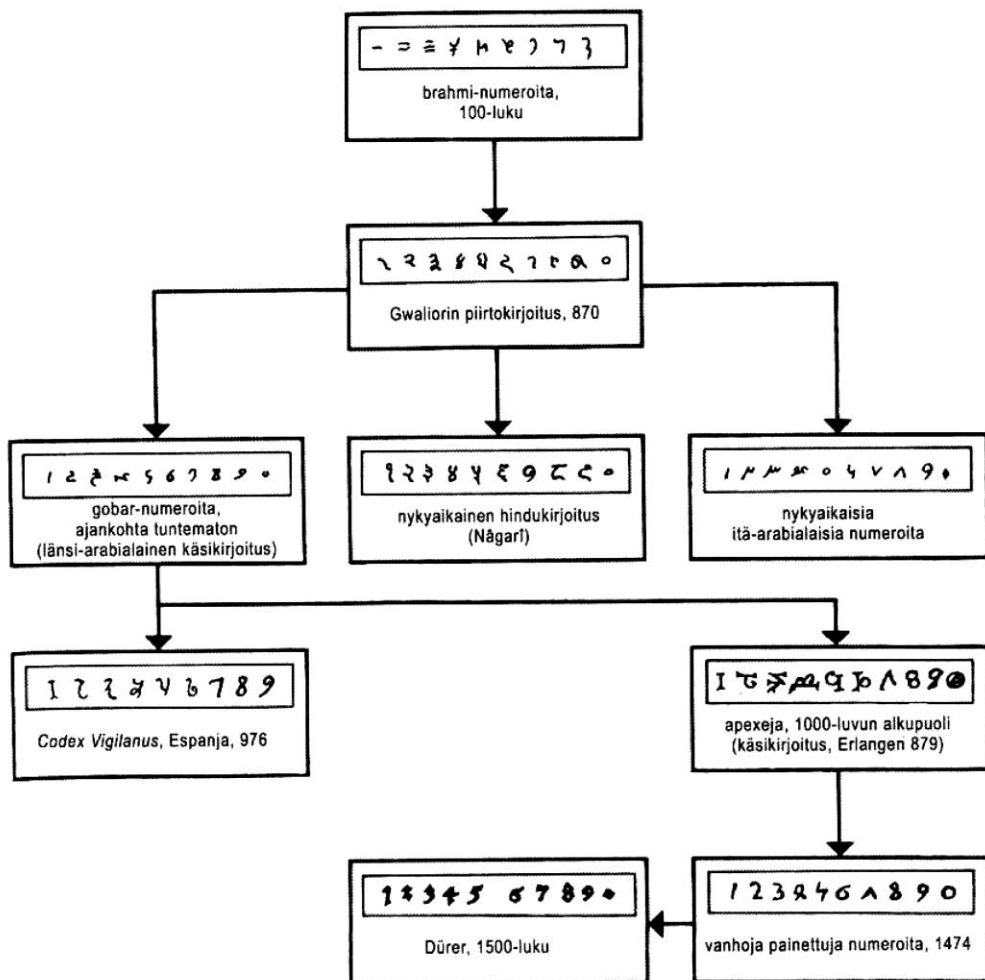
- 1) Suurteholaskennan merkitys ja toteutus, mitä varten ja miten?
- 2) Kuinka tietokonepohjaista mallinnusta voidaan hyödyntää tieteessä ja tekniikassa?

2 LASKEMISEN HISTORIAA

Luvut ovat nykyään olennainen osa kulttuuriamme. Numerot vaikuttavat itse asiassa kaikkiin tunnettuihin yhteiskunnan muotoihin enemmän tai vähemmän. Menneisyyteen katsoessa, voimme huomata, että luvut ovat osaltaan vaikuttaneet ajatteluamme ja tapaan, jolla suhtaudumme maailmaan. (Flegg, 2002. s.13 mukaan). Laskemisen perusteet lähtevät tuhansien vuosien takaa tarpeesta ilmaista lukumääriä. Kulttuurien väliset erot ovat vaikuttaneet tapaan ilmaista lukuarvoja. Laskemisen kehittymisen myötä erilaiset numeromerkit ovat helpottaneet vaativampien laskutoimitusten toteuttamista. Seidenberg (1962) toteaa kirjassaan, *The Diffusion of Counting Practises*, laskemisen olevan toimintaa, jonka kuka tahansa keksisi itsekseen.

Pidemmälle laskeminen on kuitenkin kehittyneempää toimintaa, vaikkakin sitä on käytetty alkeellisissakin kulttuureissa, jossain määrin. Metsästys ja keräilytaloudessa sekä maanviljelyssä laajempaa laskentatoimea ei välttämättä ole tarvittu. Useat eri alkukantaiset ihmisryhmät eivät osaa laskea kahta pidemmälle. Esimerkiksi Australian aboriginaalit käyttävät käytännössä vain kahta lukusanaa, 'yksi' ja 'kaksi'. Monista heimoista tiedetään varmasti, että ne eivät laske kahta pitemmälle ja viittaavat suurempiin lukumääriin sanalla 'monta'. Luultavasti tämä riitti kertomaan esimerkiksi mahdollisen riistan määrää. Jotkut taas menevät hieman pitemmälle yhdistelemällä näitä sanoja, ja käyttävät esimerkiksi luvusta 3 ilmaisua 'kaksi-yksi', kuvusta neljä 'kaksi-kaksi' ja luvusta 5 'kaksi-kaksi-yksi'. Samanlaista laskutapaa, niin sanottua 2-järjestelmää esiintyy Uudessa Guineassa, Etelä-Amerikassa ja Etelä-Afrikassa. Periaatteessa erityyppisiä laskentajärjestelmiä olivat 2-järjestelmä, 4-järjestelmä, 5-10 järjestelmä, 5-20 järjestelmä, sekä sormilla että varpailla laskeminen. (Flegg, 2002). Sormilla laskeminen oli aluksi luonnollisin menetelmä. Myös jalkojen varpaat -sana sisältyy useisiin alkuheimojen sanaan kaksikymmentä. Lisäksi esimerkiksi Papua-Uusi-Guineassa myös vartaloa käytettiin laskentaan. Vasemman käden tultua viiden sormen jälkeen täyteen, käytettiin vasemman puolen rannetta, kyynärpäätä, olkapäätä, rintaa ja takapuolta. Eräs selitys tähän oli, että uhrattavat ruumiinosat jaoteltiin alun perin näin. (Seidenberg, 1962 s. 1-40).

Tieto hindulaisesta kymmenkantaisesta järjestelmästä saapui nopeasti länteen ja 600- luvulta alkaen arabit olivat luoneet maailmanvaltakuntaa ja matkatessaan kohti länttä Intiasta peräisin oleva numeroiden kirjoitusjärjestelmä tuli länteen. 900- luvulla myös nolla merkittiin numeroksi. Kun murtoluvut saatiin laskentajärjestelmään mukaan, alkoi nykyinen laskennan kehitys ja yhtenäiset merkkijärjestelmät loivat pohjan matematiikan kehitykselle. Euroopassa yhtenäinen numerokäytäntö alkoi vakiintua 1500 -luvulla.



KUVIO 1 Hindulais-arabialaisten numeroiden sukupuu (Flegg, 2002, s. 165 mukaan)

2.1 Laskukoneet

Seuraavassa vaiheessa, alun perinkin kaupankäynnin yhteydessä, oli tarvetta merkitä lukuja ja summia muistiin ja useampiin merkintöihin avuksi tarvittiin muistiinpanovälineitä. Laskuja merkittiin savitauluihin nuolenpääkirjoituksella sumerilaisten tapaan. Myöhemmin laskennan apuna käytettiin laskukeppejä ja sauvoja, joihin tehtiin merkkejä eri merkkijärjestelmillä. Helmitaulujen ja laskulautojen lisäksi 1600 -luvulla keksittiin laskuviivain eli laskutikku, mitä käytettiin vielä 1900 -luvulla. Jo 1600 -luvulla muun muassa Blaise Pascal (1623-1662) ja Gottfried Leibniz (1646-1746) alkoivat ideoida mekaanista laskukoneita. Ensimmäisen kaupallisen laskukoneen teki Thomas Elsassin Colmarista (1785-1870) ja se tuli markkinoille vuonna 1810.

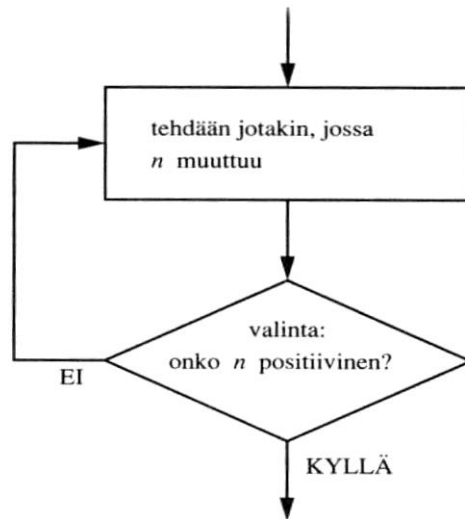
2.2 Tietokoneen toimintaperiaate

Kun vuonna 1812 Charles Babbage (1791-1871) sai ajatuksen rakentaa laitteen, jota hän kutsui differenssikoneeksi, alkoi tietokoneen idea jalostua. Idean Babbage sai J.M.Jacquardin (1715-1834) kangaspuiden ohjaamiseen käytettyä reikäkorttijärjestelmää, jolla voitiin kutoa monimutkaisia kuviokankaita. Babbagen salissa oli muotokuva, joka oli valmistettu 24 000 reikäkortin koodilla. Useimmat pitivät sitä maalauksena. Ensimmäisen toimivan version laskukoneesta rakensi ruotsalainen insinööri Georg Scheutz (1785-1873). Molempien valmistamat laitteet ovat näytteillä tekniikan museossa Lontoossa. Babbage määritteli eli speksasi "analyyttisen koneen 'ajatuksen' näin: "muisti, johon tallennetaan lukuja, aritmeettinen yksikkö, joka suorittaa näillä luvuilla aritmeettisiä tai loogisia operaatioita, ohjausyksikkö, joka saa koneen suorittamaan suunnitellut toimenpiteet, syöttölaite, jolla lukuja ja toimintaohjeita voidaan antaa koneelle, tulostuslaite laskutoimitusten esittämiseen" (KUVIO 2). Käytännössä tälle pohjalle tietokoneen perusrakenne on nykyäänkin toteutettu. Lahjakas matemaatikko, Ada Augusta, Lovelacen kreivitär (1815-1852), oppi ymmärtämään Babbagen ideat ja hän keksi ohjelmointisilmukan ajatuksen, joka on nykyisen ohjelmoinnin tuloksien mahdollistamisen yksi perusteista (KUVIO 3). Yhdysvaltain väestörekisterin tilastotieteilijä Hermann Hollerith teki kokeita lasku- ja lajittelulaitteilla, jotka toimivat tällä periaatteella, ja näitä koneita käytettiin laskennan toteuttamiseen esimerkiksi äänenlaskennassa. Laskentatoimen tehokkuus nousi noin kahden kolmanneksen verran aikaisempaan verrattuna. Täysin automaattinen tietokone teorisoitiin Englannin Cambridgessä vuonna 1832, ja rakennettiin 1937 Harvardin Howard Aikenin toimesta International Business Machines (IBM) Corporationiin, joka oli yksi suurimpia reikäkorttilaitteiden valmistajista. Yhteistyön tulos Automatic Sequence Controlled Calculator (ASCC) valmistui 1944 ja lahjoitettiin Harvardin yliopistolle, jossa se oli käytössä viitisentoista vuotta.

Ensimmäinen elektroninen digitaalinen tietokone ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Calculator) valmistui Philadelphian yliopistoon vuonna 1946. Kone sisälsi 18 000 elektroniputkea ja kaksi kymmennumeroista lukua voitiin laskea 1/5000 sekunnissa. (Flegg, 2002, s.247). Kun transistori keksittiin 1947, vahvistin putket jätettiin pois ja transistoritekniikan myötä alkoi nykyaikaisten prosessoreiden kehitys. John.W. Nyströmin (1825-1885) kerrotan keksineen Nykyisen HEXA -desimaalijärjestelmän ja se on otettu käyttöön IBM:n toimesta vuonna 1963 ja sitä käytettiin Bendix G-15 tietokoneessa. (euston96.com, 2021). Binaarijärjestelmän kehittäjäksi on taasen kerrottu olevan saksalaisen matemaatikon ja filosofin Gottfried Leibnizin (1646-1716). (study.com, 2021). Molemmat keksinnöt ovat tietotekniikan kannalta tärkeitä. Esimerkiksi c-kielen käskyt käännetään prosessorille konekieliseksi (assembler) ja myös 1990-luvulla ainakin 8-bittisen prosessorin osoitekartassa käytettiin HEXA- desimaaleja. Tieto liikkuu piirilevyllä sarja- tai rinnakkaisesti binäärimuodossa. Nykyiset kotitietokoneet yleistyivät kahdeksankymmentä luvun alussa ja niitä käytetään paljon erilaisten arkisten asioiden hoitamiseen, kuten pankkiasiointiin ja virastoasiointeihin, sekä lisäksi tiedonhankintaan ja viihdekäyttöön, kuten pelaamiseen. Ammatillisesti käyttösovelluksia on lukuisasti suunnittelusta musiikkiin. Myös etätöiden tekeminen on mahdollistunut useammassakin eri paikoissa kannettavien tietokoneiden yleistyessä.



KUVIO 2 Tietokoneen toimintaperiaate (Flegg, 2002, s. 278 mukaan)



KUVIO 3 Ohjelmointisilmukka (Flegg, 2002, s. 280 mukaan)

3 SUURTEHOLASKENTA

Suurteholaskenta voidaan jakaa kuuteen eri kategoriaan: (1) Suuren skaalan simulaatiot, jossa laskentaa käytetään fysikaaliseen tieteeseen kuten fuusiot, ilmastonmuutos ja avaruussää. (2) Keskikokoiset simulaatiot, biofysiikasta materiaalitieteisiin. (3) Dataintensiivinen laskenta, data-aineistojen analyysi, kieli-tiede ja digitaalinen ihmistiede. (4) Dataintensiiviset tutkimukset, joissa tieto on arkaluonteista. (5) Tekoäly, jossa koneoppimista sovelletaan monenlaisten ongelmien ratkaisemiseen, tyypillisesti esimerkiksi tiedon analysointi ja luokittelu. (6) Lisäksi datavirrat, jotka päivittyvät jatkuvasti. (Alfthan & Enkovaara, 2019)

Scientific American -lehdessä julkaistavalla palstalla ”Mathematical Games” esitettiin lukijoille haaste salaisen koodin ratkaisemisesta. Sen nimeksi tuli RSA-129 ja lukijoille luvattiin sata dollaria, jos he osaisivat lukea viestin. Lukioita varoitettiin siitä, että alkulukujen tekijöihin jakamiseen tarvittava ajo-aika olisi noin 40 000 miljoonaa vuotta. (Brown, 2000. s.167). Teoksessa ei tosin otettu kantaa ajojärjestelmästä. Vastaavasti avaruustutkimuksessa ja ydinreaktoreita kehitettäessä on ollut tilanteita, jossa kynää ja paperia käyttävä etevä matemaatikko olisi tarvinnut laskelmien tekemiseen miljoona vuotta. Tilanteesta selviäminen on siis yhdelle ihmiselle täysin mahdotonta, eikä ongelmaa luultavasti paljon auttaisi se, jos miljoona etevää matemaatikkoa yrittäisi työskennellä samanaikaisesti jonkin ongelman kimpussa. Se mitä tietokone esimerkiksi avaruustutkimuksessa tekee, on tärkeää ajallisesti, koska se korjaa raketin/satelliitin lentoradan juuri silloin kun se pitää korjata. Jos korjaus tehtäisiin siten, että se perustuisi kynää ja paperia käyttävän ihmisen ahkerointiin, kuluisi työssä useita vuosia, ja on helppo kuvitella, mitä kohteelle tapahtuisi tänä aikana. (Kero & Kujanen, 1989, s. 289)

Suurteholaskennan tavoite on siis ratkaista matemaattisesti haastavia ongelmia supertietokoneiden suuren laskentakapasiteetin avulla. Supertietokone kykenee laskemaan tuhansia biljoonia laskutoimituksia sekunnissa. Digitalisaatio ja kasvavat datamäärät ovat luoneet poikkitieteelliset mahdollisuudet hyödyntää laskennallisia menetelmiä ja laskennallinen tiede on Suomessa ollut perinteisesti korkeatasoista. Suomessa tutkijoiden käytössä on ollut hyvät kansalliset tietokoneressurssit. Näitä on yhdistelty pienempiin korkeakoulujen omiin hajautettuihin laskentaresursseihin, sekä myöskin kansainvälisiin todella suuriin vastaaviin. Suomi, sekä kahdeksan muuta maata, isännöivät pian yhtä maailman tehokkainta supertietokonetta, kun EuroHPC-hankkeen LUMI-supertietokone (Large Unified Modern Infrastructure) sijoitetaan Suomen Kaajanissa sijaitsevaan datakeskukseen. Tieteen kansallisesta kilpailukyvyistä on syytä pitää jatkuvasti huolta. Omat supertietokoneet ja maailman huipputason resurssit mahdollistavat osaavan tutkijayhteisön ja kansainvälisen yhteistyön muodostumisen, sekä pääsyn todella suuriin laskentaresursseihin. (Nieminen, 2020)

Eurooppalainen suurteholaskentaan liittyvä yhteistyö on yksi kriittisistä menestystekijöistä Suomelle, koska se lisää kilpailukykyä ja tuottavuutta. Su-

pertietokoneiden kautta datan hyödyntäminen ja laskennallinen tiede ovat avainasemassa, kun etsimme ratkaisuja ihmiskunnan suurimpiin haasteisiin (CSC, 2021). CSC – Tieteen tietotekniikan keskus Oy:n (CSC) erityistehtävänä on auttaa suomalaista tutkimus- ja koulutusyhteisöä menestymään. Tätä varten CSC tarjoaa tutkijoiden käyttöön laskenta- ja datanhallintaympäristön, nopean kansallisen tutkimusverkon, sekä korkeatasoista asiantuntijatukea. Monet tietentekijät ovatkin vuosien varrella käyttäneet Sisu-supertietokonetta, Taitolaskentaklusteria sekä näiden edeltäjiä viimeisen 30 vuoden aikana. CSC:n ensimmäinen supertietokone, Cray XMP, otettiin käyttöön syksyllä 1989. (Alfthan & Enkovaara, 2019)

3.1 Supertietokoneet

Supertietokoneilla tarkoitetaan kaikkein nopeimpia ja tehokkaimpia tietokonejärjestelmiä. Huippusuorituskyky on saatu aikaan sellaisilla järjestelmärakenteilla ja komponenttisuunnittelulla, jotka mahdollistavat tehtävien rinnakkaisen käsittelyn ja tiedonsiirron ja tallennuksen, useilla eri tasoilla samanaikaisesti. Tiedonsiirtoon verkkotasolla liittyvä tiedonsiirtotekniikka on standardoitu, joten tieto liikkuu samassa moodissa järjestelmien välillä. Tätä hyödynnetään muun muassa lohkoketjutekniikassa, (Block Chain), jonka kerrotaan olevan yksi suurimmasta tietotekniikan sovellusten mullistajasta internetin jälkeen. (CGI, 2020). Lohkoketjutekniikassa tietokanta on hajautettu pieniin palasiin ja kryptattu siten, että nykyisellä laskentateholla sitä ei voida murtaa. Tätä tekniikkaa sovelletaan useissa eri tietoturva tarvitsevilla sovelluksissa pankkitoiminnasta ruoan tuotantoketjujen seuraamiseen, sekä myöskin kryptovaluutoissa, bitcoin lienee ensimmäinen lohkoketjutekniikan hyödyntäjä. (Yaga, Mell, Roby & Scarfone, 2019)

Suorittamalla tietokoneen laskentatoimenpiteitä samanaikaisesti rinnakkain, voidaan tehtävien kokonaissuoritusaikaa lyhentää oleellisesti. Tämä ajattelumalli kehittyi 1970-luvun alussa ja se on perustana nykyisten supertietokoneiden suunnitteluun ja niiden systemaattiseen kehittämiseen. 1970-luvun alkuun mennessä kehitetyt supertietokoneet, silloisten mittojen mukaan huipputehokkaat CDC:n 6600- ja 7600 sarjat ja IBM:n 360, loivat puitteet skaalarikoneiden rakentamiselle.

Useissa tietokonearkkitehtuureissa on hyödynnetty rinnakkaisuuden käsitettä eri tasoilla, kuten muistinhallinta. Kun useita laskentaoperaatioita suoritetaan samanaikaisesti, puhutaan vektoriprosessorista. Rinnakkaiset laskentaoperaatiot kohdistuvat yleensä vektoreihin tai matriiseihin, mistä nimi vektoriprosessori on peräisin. Alun perin niin sanottuja supertietokoneita on käytetty siviilikäytössä luonnontieteen, tekniikan ja kauppatieteiden alueilla. Tehtävät ovat muodostuneet laajoista matemaattisista malleista. Alun perin malleissa on menetelminä käytetty matriisioperaatioiden lisäksi lineaarisia yhtälöryhmiä, sekä osittais- differentiaaliyhtälöitä, numeerista approksimointia ja Fouriermuunnoksia. (Karhu, 1984)

Nykyiset superkoneet ovat useista sadoista prosessoreista ja muutamista eri prosessorityypeistä koostuvia laitteita (TAULUKKO 1). Supertietokoneissa käytetään useampia suorittimia rinnakkain ja prosessoreissa on useita ytimiä. Suomessa uusimman projektivaiheessa Mahti- nimellä tunnetun supertietokoneen prosessoriytimiä tulee olemaan noin 200 000 ja sen potentiaalinen laskentateho on 6,5 petaflopsia. (Alfthan & Enkovaara, 2019)

Moniydinprosessoreissa ytimien, (joita on nykyään 2-n kappaletta), välistä keskinäistä tehtävien suoritusta jaetaan säikeisyysteknologialla. Lisäksi koneen sisäisten suorittimien välinen nopea kytkentäverkko on keskeisessä asemassa. Myös eri tason käyttömuistin välinen tiedonsiirto vaikuttaa käsittelynopeuteen sekä piirilevyjen "kaistanleveys" eli väylät (8bit-64bit ja leveämmät) ja muu vastaava suunnitteluarkkitehtuuri.

Supertietokoneiden toteutustapa voidaan jakaa karkeasti kahteen, MPP (Massively Parallel Processing) ja klusteritekniikka. Näistä ensimmäinen toteutetaan samaan yksikköön ja tilaan. IBM Blue Gene/Q, Jugueen sisältää 458,752 prosessorin ydintä, joita hallinnoidaan usealla eri ohjelmointikielillä kuten C, C++, Fortran ja CUDA/Open CL. Esimerkiksi tietokannat on yleensä toteutettu C- ja C++ kielillä. CUDA on ohjelmointikieli grafiikka- eli GPU prosessoreille (Schober, 2018). Lisäksi järjestelmä pystyy kommunikoimaan myös Linux -käyttöjärjestelmiä käyttävien ulkopuolisten tietokoneiden kanssa. Suomalainen Puhti supertietokone sisältää 682 laskentasolmua, joissa kaksi 20-ytimistä Intel Xeon Gold 6230, 2,1Ghz prosessoria. Muistia on varattu 192Gb - 1,5TB per solmu. Nopea 100Gbps infiniband HDR kytkinverkko yhdistää laskentasolmut. Levyjärjestelmä on 4PB Lustre rinnakkaislevyjärjestelmä. Tällä kokoonpanolla päästään teoreettisesti 1,8 Pflops laskentatehoon (Alfthan & Enkovaara, 2019).

Pelkästään useita tietokoneita yhdistämällä voidaan myös luoda järjestelmä, joka ratkoo rinnakkain laskelmia. Tietokoneverkolla voidaan luoda niin sanottu klusteri, ryväs tai rypäs, jossa osapuolet ovat vaikutuksessa keskenään. Tässä ratkaisussa useita tietokoneita on kytketty nopeilla yhteyksillä toisiinsa. Klusteritekniikassa yksi tietokone toimii palvelimena, joka jakaa useampien tietokoneiden kanssa tehtäviä. Tätä toimintamallia voidaan verrata moniydin-suorittimien ja moniprosessoristen tietokoneiden toimintaan. Hajautetussa tietojenkäsittelyssä verkkolaskennalla tarkoitetaan myös laskentaa siis rypässä, jossa useat eri paikoissa olevat koneet suorittavat jotain laskennallista tehtävää.

Klusterointitekniikalla pyritään samaan kuin MPP:ssä ja yleensä tietokoneissa. Erona on se, että laitteet tai yksiköt prosessoreineen ovat kauempana toisistaan, mutta periaate on sama. Tätä voidaan ajatella toisin sanoen hajautetuna tietokoneena. Tällaisessa ratkaisussa tiedonsiirron merkitys korostuu. Rinnakkainen tiedonsiirto on nopeampaa kuin sarjamuotoinen. Nykyiset valokuidut ovat hyvä ja nopea tiedonsiirtotapa kun tehdään tietoverkkoja. Myös langaton tekniikka on kehittynyt, mutta se on häiriöherkempää kuin fyysinen tiedonsiirto.

Supertietokoneteknologia ja klusteritekniikka lähenevät toisiaan, mutta jo määritelmänsä mukaan supertietokone käyttää tehokkaimpia saatavilla olevia prosessoreita ja kytkentäverkkoja. Tavallisista tietokoneista rakennettu

verkkoa ei ole suunniteltu tehokkaaseen rinnakkaislaskentaan ja siksi suurteho- laskentaan tarvitaan käytännössä siihen suunniteltu kone. (Kankaala, 2000).

Suomessa on aiemmin käytetty muun muassa 1989 käyttöön otettua Cray X-MP konetta ja sitä on hyödynnetty muun muassa fysiikan virtauslaskennassa ja kemian molekyyliidynamiikkasimulaatioissa. Uusin supertietokone Suomessa on Kajaaniin sijoitettu LUMI (Large Unified Modern Infrastructure) - supertietokone, jonka teoreettinen laskentateho on yli 200 petaflopsia $2 \cdot 10^{17}$ liukulaskentatoimitusta sekunnissa. Tämä on saavutettu pääosin suurella määrällä kiihdytinprosessoreita, yleiskäyttöisillä grafiikkaprosessoreilla (GPU, Graphics Processing Unit), sekä tavallisista CPU:ista (Central Processing Unit) rakennetulla osiolla. Lisäksi tarvitaan interaktiivista data-analyysiosiota, ja pilvilaskentakapasiteettia. Tallennuskapasiteettia koneessa on yli 60 petatavua nopeaa levytilaa. Flash -teknologiaan pohjautuvaa muistia sisältävä 5 petatavun levyosio tuottaa yli teratavun sekunnissa. (CSC, 2021).

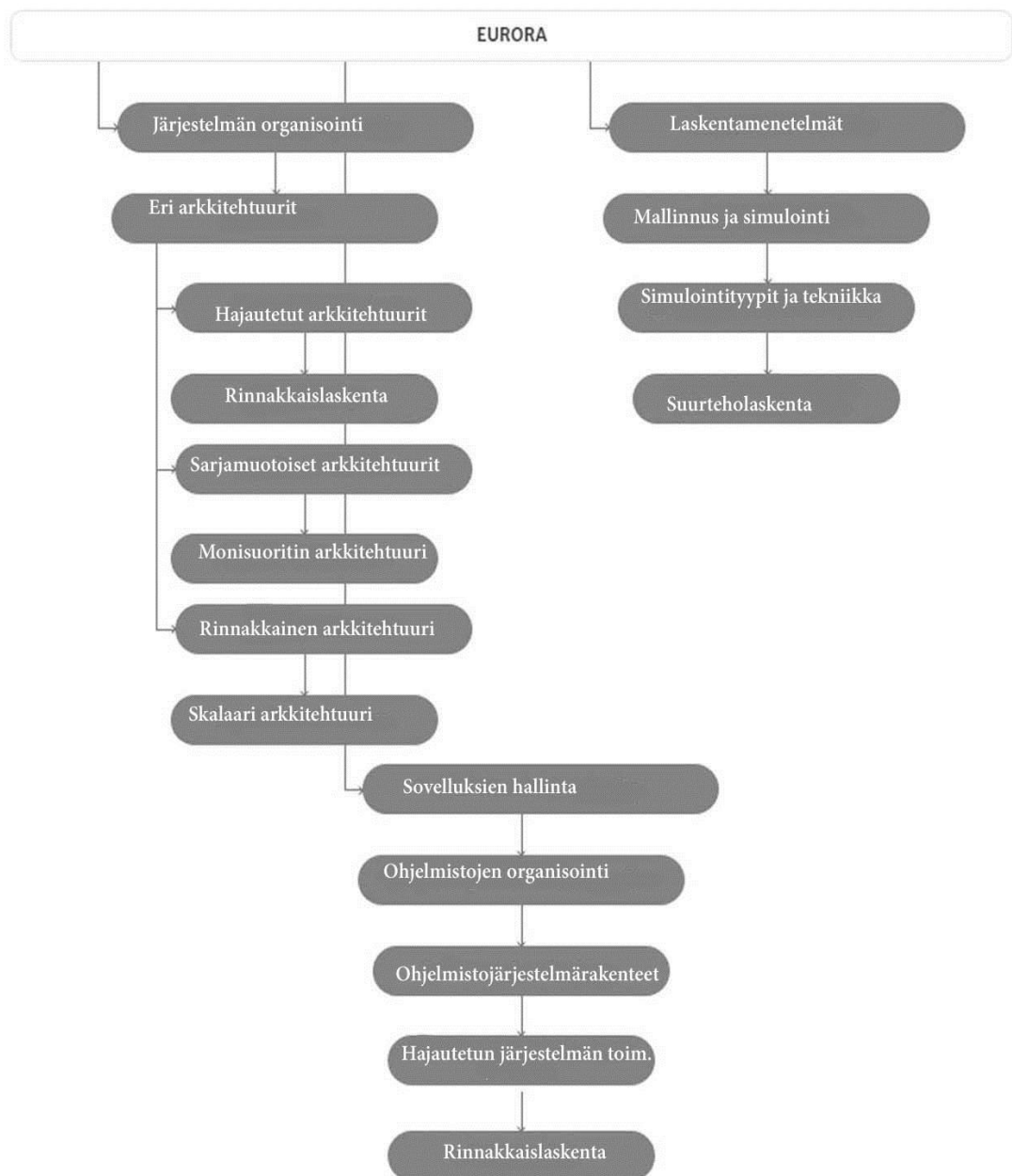
Proessori	Kaikki %	Lasku- toimituks et	Laskutoimitusten kesto aika [hh:mm:ss]
Yhteensä:	100%	372320	01:49:87
CPU	22.8%	85046	00:47:36
MIC	0.7%	2500	00:56:28
GPU	76.4%	284774	00:06:23

TAULUKKO 1 Suurteholaskennassa käytettyjen eri prosessorityyppien laskentatehoja, (Yokota, Weiland, Keyes & Trinis 2018, s. 21 mukaan)

EURORA on lyhenne sanoista; EUROPEan many integrated cORE-architecture, ja sitä kutsutaan prototyyppiarkkitehtuuriksi. Kaksi järjestöä; CINECA, italialainen voittoa tavoittelematon yliopistoyhteenliittymä, ja EUROTECH, italialainen tietotekniikka yhtiö, ovat kehittäneet hankkeen PRACE 2IP. EURORA-suunnittelutavoitteena on ollut mahdollistaa korkea suorituskyky ja suuri skaalautuvuus suosituille eurooppalaisille tieteellisille sovelluksille. Myös taloudellisesti on pyritty kohtuulliseen kokonaiskustannukseen. EURORA arvioi järjestelmän tehokkuuteen liittyviä järjestelmämittareita, kuten virrankäytön tehokkuutta ja liukulukuoperaatioiden määrää sekunnissa wattia kohti (flopit/watti). Projektin tavoitteena on ollut suunnitella uusia ratkaisuja, kuten tulevaisuuden exaflops-arkkitehtuurit. EURORA mahdollistaa Message Passing Interface-

kirjastopuheluiden optimoidun osajoukon siirtämisen ja testaamisen, mikä taas sallii yhteyden sekä 3D-torus-liitántärajapinnoista että Many Integrated Core-tietoliikenneyhteyksistä. (Cavazzoni, 2012).

Tämä viitekehys antaa mahdollisuuden laskentakapasiteetin yksilölliseen määrittelymiseen, tekoälyn eri menetelmien soveltamiseen, syväoppimiseen, perinteisiin laajan skaalan simulaatioihin sekä suurten datamassojen hyödyntämiseen. Näitä ominaisuuksia voidaan käyttää laskettaessa entistä tarkempia malleja. Tekoälyä voidaan soveltaa suurempiin tietomääriin, mittausten ja jo mitattujen tulosten simulointiin ja uudelleen analysointiin materiaalitieteessä.



KUVIO 4 Eurora arkkitehtuuri. (Cavazoni, 2012. s.2 mukaan)

3.2 Kvanttitietokone

Kvanttitietokoneita on pystytty mallintamaan teoriatasolla jo kymmeniä vuosia. Fyysikot ovat kehittäneet erilaisia kvantti -ja atomitason ratkaisuja, mutta mikrokonsa ja äärettömän nopeutensa (puhutaan elektronien kiertoradoista ja asennoista, sekä fotonien liikkeistä) vuoksi, näitä ei ole aiemmin pystytty teknisesti toteuttamaan. Toimivia ratkaisuja ovat vasta viime vuosikymmenellä tehneet kaupallisista yhtiöistä IBM ja Google. Väitetään että Googlen rakentama 54-kubitinen kone on pystynyt ratkaisemaan 3min 20s tehtävän, joka olisi vaahtunut perinteiseltä supertietokoneelta 10 000 vuotta. Tämä tieto on Financial Timesin mukaan lipsahtanut NASA:n (The National Aeronautics and Space Administration) verkkosivuille vuonna 2019. Se kuitenkin poistettiin pian, mutta lehden väitetään saaneen kopion raportista (Murgia & Waters, 2019).

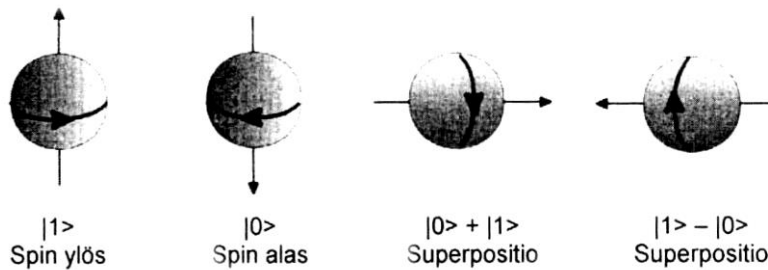
Kvanttitietokone on toimintaperiaatteeltaan analoginen verrattuna digitaaliseen tietokoneeseen. Klassisessa tietokoneessa bittien tilaa manipuloidaan loogisilla porteilla kuten AND, OR ja NOT, jossa esimerkiksi kahden sisäänmenobitin arvo määräytyy portin mukaan ulostulossa '0' tai '1'. Kvanttitietokoneessa loogiset portit ovat matriiseja, joille pätee ainoastaan yksi sääntö; matriisin on oltava unitaarinen $U^*U=UU^*=I$. (Joutsjoki, 2019, s.20 ja Rasila, 2016, s.2). Digitaalisessa tietokoneessa laskutoimituksia tehdään yksi kerrallaan miljoonasosa sekunnissa, kun taas kvanttikone pystyy tekemään niitä rinnakkaisesti lähes yhtä aikaa. Tämä perustuu digitaaliseen tekniikkaan verrattuna siihen, että yksi bitti voi saada myös välitilan ns. superpositiotilan aikaisempaan digitaalitekniikkaan verrattuna. Superpositiotila tarkoittaa perinteisen '0' ja '1' tilan sijaan välimuotoa, jolloin laskutoimituksia on valmiina hetkellisesti rinnakkain koko kubittikartan tilan? Merkittävä ero näiden kahden tietokoneen välillä on yleinen toimintatapa. Kun klassiset tietokoneet toimivat deterministisesti, eli laskennan tulokset saadaan mitattua ilman virheitä, ovat kvanttitietokoneet probabilistisiä, eli todennäköisyyksiin perustuvia. Tämän takia kvanttitietokoneella tehtävät laskelman joudutaan tekemään useita kertoja mittausvirheen pienentämiseksi (Mäyrä, 2017. s.4, Huang, Yang, Chan, Tantu, 2019).

Kvanttitietokoneessa perusyksikön nimi on kubitti (kvanttibitti, quantum bit, qubit). Kubitti voi olla missä tahansa tilassa, kunnes kubitin tila mitataan. Tällöin kubitin superpositiotila tuhoutuu. (Joutsjoki, 2019, s.19). Tämä on kvanttitietokoneen ominaisuus, jolloin tieto ilmenee kubiteissa atomitason analogisessa muodossa hyvin vähän aikaa ja tällöin se pitäisi saattaa talteen ja muuttaa talletettavaan digitaaliseen muotoon. Fyysisesti kubitti voidaan teoriassa toteuttaa monella eri tavalla.

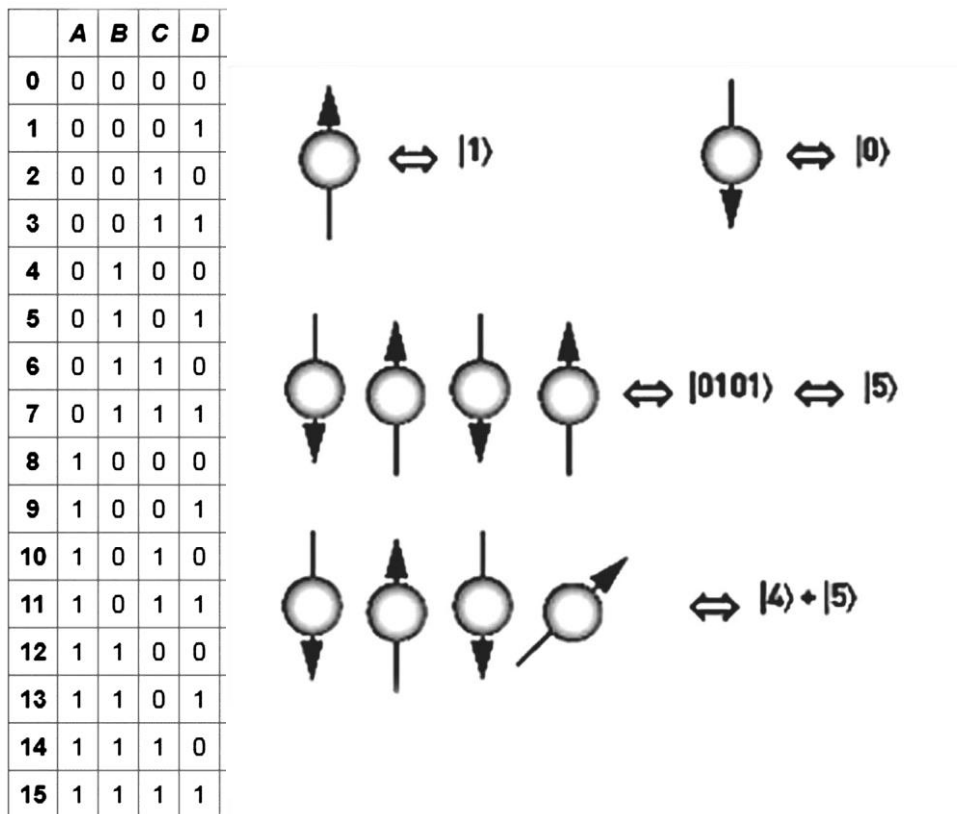
Suprajohtavissa piireissä kubitin nolla ja yksi on koodattu sähköän edestakaiseen liikkeeseen eli värähtelyyn piirissä. Jos sähkö värähtelee pienimmällä mahdollisella energialla, kubitti on tilassa nolla. Jos taas kubitissa on yksi värähtelykvantti eli fotoni energiaa, se on tilassa yksi. Jos fotoni on vain puoliksi kubitin sisällä, on kubitti nolla ja yksi yhtä aikaa. (Möttönen, 2019). Kubitti pitää tietonsa hieman varmemmin hyvin pienen hetken ja tänä aikana se pitäisi saada talteen. Kvanttitietokoneen toiminnasta on matemaattisia algorit-

meja, joilla voidaan demonstroida, miten kvanttikoneella voidaan ratkaista tietyn tyyppisiä ongelmia vähäisemmällä määrällä kuin perinteisellä tietokoneella. Esimerkiksi Groverin hakualgoritmillä voidaan löytää hakukartasta haluttu alkio aikakompleksisuudella $O(\sqrt{n})$, kun perinteinen tietokone suorittaa saman haun $O(n)$, joten haku aika puolittuu. Deutsch-Jozsa algoritmilla voidaan funktion kutsuja vähentää lukuisista yhteen, jolloin tiedetään, onko kyseessä vakio- vai tasafunktio (Joutsjoki, 2019, s.22).

Kun elektronin spin mitataan, laitteiston suunnasta riippumatta se näyttää osoittavan kahdesta suunnasta toiseen – laitteen suhteen ylös tai alas. Jos ylös polarisoiden elektronin spin mitataan vaakatasossa, elektroni osoittaa satunnaisesti jompaankumpaan suuntaan vaakatasossa. Vaakatason spin suunta voidaan tulkita ylös ja alas-suuntien superpositioksi. Monissa tilanteissa elektronilla ei ole minkäänlaista määrättyä spinin suuntaa ennenkuin se mitataan (KUVIO 6). Analoginen tieto on hyvin herkkää sähköisille ilmiöille ja jos kubittien tasolla liikutaan kvanttifysiikan tasolla, häiriöherkkyys on moninkertainen verrattuna esimerkiksi digitaaliseen, koska jännitetasot ovat lähes olemattomia. Tarkkoja speksejä (määritelmiä) kaikista kvanttitietokoneen toteutuksista ei välttämättä edes ole vielä tarjolla.



KUVIO 5 Elektronien spintilat. (Brown, 2000, s.131 mukaan).

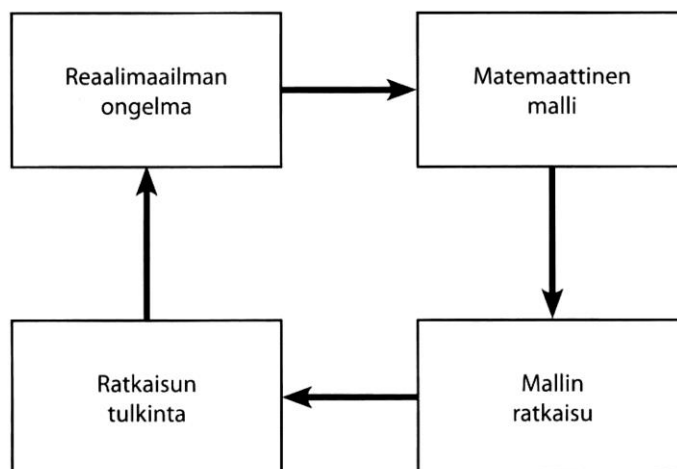


KUVIO 6 Bitti-kartta ja kvanttikoneen kubitin laskutoimitus (Waldner, 2006, s.157 mukaan)

4 MALLINTAMINEN

Mallintamisella tarkoitetaan jonkin todellisuuden osan, ilmiön tai systeemin esittämistä keinotekoisella tavalla. Mallintamisen perusesimerkki voisi olla esimerkiksi kartta, joka on pienoismalli todellisuudesta. Hieman pidemmälle vietyinä mallintaminen voidaan toteuttaa esimerkiksi painovoimamallin kuvaamisena matemaattisesti. Laskennallinen tiede tutkii kompleksista ilmiötä tietokoneiden avulla. Ilmiötä mallinnetaan matematiikan kielellä, joka mahdollistaa numeeristen ennusteiden ja analyysien tekemisen monimutkaisista kokonaisuuksista. Laskennallisen tutkimuksen välineet numeerisista menetelmistä, oppivista algoritmeista ovat kehittyneet rinnan laskentateknologian kanssa. Laskentanopeus, massiiviset datavarastot ja nopea tiedonsiirto ovat suurteho-laskentaa hyödyntävän tutkimuksen kivijalkoja. Matemaattinen mallintaminen perustuu matemaattisen mallin käsitteelle. Mallin rakentaminen vaatii matematiikan lisäksi muiden tarvittavien tieteenalojen asiantuntemusta, sivistynyttä arvaamista ja tiedon keräämistä sekä käsittelyä. Mallinnusta käytetään ilmiöiden simuloimiseen ja käyttäytymisen ennustamiseen eri tilanteissa. Mallinnuksessa saadaan yleensä tuloksia nopeammin ja halvemmalla, kuin itse prosessia seuraamalla. (Pohjolainen, 2010)

Ensin on rakennettava ilmiön matemaattinen malli (KUVIO 7). Opetuskäyttöön tarvitaan helposti mallinnettavia riittävän yksinkertaisia ilmiöitä. Joillakin opiskelijoilla saattaa olla ehdotuksia heitä kiinnostavien ilmiöiden mallintamisesta. Mallien yhtälöt ratkaistaan tavallisesti tietokoneella ja sopivilla tietokoneohjelmistolla. Opiskelijoiden tulisi myös hallita tarvittavat matemaattiset ratkaisumenetelmät ja mallinnusohjelmistojen ohjelmointi ja käyttö. (Pohjolainen, 2010. s.13 mukaan).



KUVIO 7 Matemaattisen mallintamisen vaiheet (Pohjolainen, 2010 s.12 mukaan)

Laskentatehon lisäksi tarvitaan hyviä tutkimusideoita ja sopivia rinnakkaistuvia koodeja. Tehdäänkö nykyisin komplisoituja ja vahvasti optimoituja koodeja vai ajetaanko hieman karkeammalla koodilla, koska "tietokoneaikaa" on saatavilla, kysyy Kari Laasonen artikkelissa "Uusi Supertietokone CSC:hen". Artikkelissa todetaan myös poikkitieteellisyyden merkitys mallinnuksessa (Kankaala, 2000. s.2 mukaan). Esimerkkejä laskennallisen tutkimuksen kohteista on lukuisia. Kasvavat tietomassat ja data- aineistot ovat tuoneet myös ihmis- ja sosiaali-tieteet laskennallisen tutkimuksen piiriin. Kenties vaativin kohde on aivojen toiminnan simulointi, joka edellyttää triljoonien synapsien samanaikaista käsittelyä kompleksisessa ympäristössä pitkien ajanjaksojen yli. (Nieminen, 2020).

Laskentatehon tarve pohjautuu hyvään matematiikan ja fysiikan osaamiseen. Matemaattinen mallintaminen vaatii tietyn perustason ja mallinnuksen opiskelu voidaan aloittaa vasta matemaattisten peruskurssien jälkeen. Ilmiö voidaan mallintaa vasta, kun se on rakennettu matemaattisin kaavoin ja algoritmein. Ensin on siis rakennettava ilmiön matemaattinen malli. Opetuskäyttöön riittävät havainnolliset ja yksinkertaiset ilmiöt. Parhaassa tapauksessa opiskelijoilla saattaa olla ehdotuksia heitä kiinnostavien ilmiöiden mallintamisesta. Valmiit mallinnuksen yhtälöt ratkaistaan sopivilla tietokoneohjelmistoilla. Tärkeimpiä ovat (2010): Matlab, Mathematica, sekä suomalainen Elmer. Opiskelijoiden tulisi myös hallita tarvittavat matemaattiset ratkaisumenetelmät ja mallinnusohjelmistojen ohjelmointi ja käyttö (Pohjolainen, 2010). Tärkeä osa tulosten tarkastelua varten on mallin validointi, eli simulaatiotulosten laadun ja tarkkuuden arviointi.

4.1 Simulointi ja emulointi

Kun matemaattinen malli on rakennettu, sen avulla voidaan ryhtyä tutkimaan mallinnettavaa ilmiötä. Malli voi olla matemaattisesti tehty monimutkaisen todellisuuden simuloiminen. Lähtöarvoja, parametrejä ja muuttujia voidaan muunnella vastaamaan erilaisia olosuhteita. Tätä kutsutaan simuloinniksi. Simuloinnin antamia tuloksia verrataan todellisesta ilmiöstä saataviin mittaustietoihin. Simuloitaessa pyritään toteuttamaan simuloitavan kohteen käytöstä tai toimintaa. Onnistuneen simulaatiomallin tärkeimpänä piirteenä pidetään toistettavuutta. Simuloitaessa tulee saada aina samoilla parametreillä identtiset tulokset ja kaikki satunnaisuus syntyy esimerkiksi rajoitetun satunnaislukugeneraattorin vaikutuksesta. Emulaatiomallin taas on oltava mahdollisimman vakaa eli robusti. Emulointi poikkeaa simuloinnista, emuloinnissa pyritään mallintamaan kohteen sisäinen toiminta (Mäyrä, 2017. s.2 mukaan).

Emulointia voisi kuvata myös sanalla matkiminen. Esimerkki emuloinnista on Windows XP -virtuaalikone, joka toimii 16-bittisine ohjelmineen myöhemmin tehtyjen Windows versioiden kanssa. Vastaavasti esimerkiksi pelikonsoleja voidaan pelata eri käyttöjärjestelmäympäristöissä emuloimalla. Emulaatiomallissa kaikki päätökset ja toiminnot tapahtuvat reaaliajassa. Tarvitta-

vien mittaustietojen hankkimiseksi on usein tehtävä kokeita. Mittaustietojen avulla voidaan myös mallin tuntemattomia parametrejä arvioida ja malli sovitaa olemassa oleviin tietoihin. Mittaustietojen perusteella tapahtuu myös mallin validointia. Siinä arvioidaan kuinka hyvin malli kuvaa alkuperäistä ilmiötä ja kuinka luotettavia simulointitulokset ovat. Myös kaupan ja markkinoinnin sovellukset saattavat vaatia yhtäaikaista rinnakkaislaskentaa sekä laskutoimituksia, joita suoritetaan rinnakkain ja algoritmien kautta yhtäaikaisesti, jolloin saadaan lähes reaaliaikaista tulosta. (Pohjolainen, 2010)

4.2 Esimerkkejä mallintamisesta

4.2.1 Biotekniikka ja ympäristönsuojelu.

Eräs eniten käytetty matematiikan sovellus on biotieteiden mallinnuskenttä. Solun toiminnan mallintaminen on perusyksikkö, kun mallinnetaan aiemman tiedon perusteella biologisia toimintoja. Näillä menetelmillä mallinnetaan esimerkiksi entsyymireaktioiden dynamiikkaa, erilaisten jarruttavien ja katalyyttisten tapahtumien tai oskillaatioiden ilmentymistä. Teoreettisista mallinnusaiheista on yleensä hyvin pienten aineen osien käyttäytyminen, molekyylihallinnus ja esimerkiksi kvarkkien toiminnan mallintaminen. Käytännön läheisempiä esimerkkejä ovat esimerkiksi maaperän puhdistaminen ja kemikaalien poistot, jotka ovat haasteellisia tehtäviä ympäristön suojelussa. Biologinen tutkimus edellyttää maaperän kuvaamisen osaamista mikrobiologian näkökulmasta.

Mallinnuksen kautta voidaan tutkia esimerkiksi bioprosesseja sekä populaatiomallinnusta. Lisäksi maaperän rakenteen mallintaminen sisältävät lukuisia muuttuvia tekijöitä. Pohjavesien saastumisen tutkiminen, torjunta-aineiden, sekä lannoitteiden, ynnä muiden vastaavien kemikaalien vaikutus, ovat tehotalouden tuomia ongelmia. Kaivojen ja niistä saatavien vesimäärien vaikutus pohjavesitilanteeseen on tärkeää tietää etukäteen sekä esimerkiksi saasteiden leviämistä pohjavesissä voidaan tutkia mallinnuksen kautta. Suojelu ja ennalta ehkäisy, sekä mahdollisen tapahtuneen onnettomuuden tutkiminen, ovat mallinnuksen kohteita biotekniikassa. Lisäksi yksi haasteellisimmista kohteista biologisessa mallinnuksessa on ihmisaivojen simuloiminen. Lääketeollisuuden uusien koko genomien sekvensoimien mittalaitteiden datan analysointi ja yhdistäminen kliiniseen dataan taas voi tuoda lisävaloa sairauksien ja perinnöllisten sairauksien syihin ja yksilölliseen hoitoon. (Pohjolainen, 2010)

4.2.2 Energiatalouden tutkimus

Energiatalouden tutkimus ja reaktoreiden käytetyn uraanin valmistus edellyttävät radioaktiivisen isotoopin eristämistä uraanista. Hyötykäyttöön soveltuva isotoopin pitoisuus on pieni. Erotusmenetelmää kutsutaan sentrifugiksi, ja siinä uraani pystytään erottamaan kahdeksi eri jatkeeksi. Tässä menetelmässä ei toteuteta erottelua lähimainkaan tarkasti. Se tiedetään, että toisessa jatkeessa raskaamman isotoopin pitoisuus on kasvanut muutaman prosenttiyksikön. Öljyte-

ollisuudessa etsitään maaperämalleja seismisten signaalien analysoinnilla inversioteorian kaltaisen matematiikan kautta. (Pohjolainen, 2010)

4.2.3 3D- tulostus ja tuotesuunnittelu

Matemaattisia malleja voidaan käyttää tuotesuunnittelun apuvälineinä usealla eri osa-alueella, kuten kuvaus ja visualisointijärjestelmien toteutuksessa ja CAD-suunnittelussa (computer aided designing), autoteollisuuden muotoilussa, sekä huonekalu ja vaatesuunnittelussa. Tuotteiden geometriset mallit vaativat usein paljon matemaattista mallintamista ja usein mallinnuksen jälkeen voidaan tuote tai kappale työstää tai nykyään myös 3D mallintamisen jälkeen tulostaa 3D- tulostimilla. Lisäksi optimointia voidaan kehittää tietokoneavusteisesti. (Pohjolainen, 2010)

4.2.4 Kognitiotiede

Kognitiotiede, laskennallinen aistimustekniikka ja koneaistit ovat tietotekniikan ja kehittyneen mittaustekniikan yhteisiä perillisiä. Tähän liittyy erilaisista kohteista koottavaa havaintodatan keruuta ja tähän dataan pohjautuvaa analyysiä, jonka tarkoituksena on tunnistaa tapahtumia, merkkejä, kuvioita ja merkityksiä. Data muodostuu signaaleista ja tämä signaali voi olla yhtä hyvin tekstijono, siirtymämittaussignaali, kromatografinen spektri, EKG (ECG, electro cardio diagram, sydänfilmi), EEG (electroencephalogram, aivosähkökäyrä), valheenpaljastimen tulosnauha tai videokuva. Signaalien analysoinnin matemaattisten apuneuvojen kehitys tarkoittaa esimerkiksi aikasarjamallien tutkimusta, moniulotteisten signaalien analyysimenetelmää, epälineaaristen suotimien tutkimista, luokittelualgoritmien teoriaa ja hahmontunnistusta. (Pohjolainen, 2010)

4.2.5 Kryptografia ja kryptaaminen

Kryptografia on datan muuttamista toiseen muotoon. Matemaattisella kaavalla bittien järjestys muutetaan ja saman matemaattisen kaavan kautta tieto palautetaan alkuperäiseen muotoon. Tämä perustuu osittain siihen, että suuria lukuja on vaikeaa jakaa tekijöihin. Kryptaamisella pyritään turvaamaan kahden välinen kommunikointi kolmannelta osapuolelta siten, että viestit eivät ole luettavissa ilman lisätietoa käytetystä salaussalauksimenetelmästä, sekä moderneissa kryptosysteemeissä pyritään viestin lähettäjä varmentamaan (Joutsjoki, 2019, s.6). Tärkeimpiä moderneja yksityisavain -algoritmeja ovat esimerkiksi RSA, Data Encryption Standard, RC2, RC4, RC5, IDEA ja Skipjack sekä Data Encryption Standard DES, jonka Yhdysvaltain hallitus nosti standardikseen jo vuonna 1977. (Brown, 2000) Näissä eri kryptauskoodeissa käytetään korkeita potensseja ja voidaan vain kuvitella esimerkiksi datan seulomista datavirrasta, jossa liikkuu kaikki eri kryptauskoodit ja sanomat yhtä aikaa eri muodoissa. Tämä vaatii varmasti suurta rinnakkaista laskentatehoa ja laskentakapasiteettiä.

4.2.6 Meteorologia

Meteorologiassa voidaan tutkia erilaisten sääilmiöiden kuten tsunamien ja hurrikaanien käyttäytymistä etukäteen. Perinteinen luonnosta ennustaminen on mahdollista kokemuspohjaisesti. Vanhan kansan ennusteet saattavat hyvinkin pitää paikkansa lyhytaikaista säätä ennustaessa, mutta esimerkiksi ilmastonmuutoksen mallintaminen vaatii huomattavasti enemmän tietoa ja tilastoja. Mallinnuksen kautta mallitiedot ja havainnot voidaan muuttaa numeerisiksi ja säilöä numerojoukkona tietovarastoon. Tämän tiedon perusteella meteorologit voivat yhdistellä ja muokata niitä eri lähteistä tulevien tietojen mukaan. Tyypillisiä lämpötilavaihteluita ovat suuret erot rannikon ja sisämaan välillä. Yksi meteorologi pystyy tekemään lukuisia ennusteita työvuoronsa aikana. Sääennusteiden merkitys on suurempi esimerkiksi säästä riippuvaan liikenteeseen ja ammatteihin kuten merenkävijöihin, lentoliikenteeseen, maanviljelyyn, rakennusosalalle, sekä puolustusvoimien toimintaan. Myös yleinen kunnossapito on osa infrastruktuuria, jossa sään mallinnuksesta on hyötyä. Näkyvyystiedot sekä tuuli- ja myrskytiedot, ovat tärkeitä yleensäkin koko yhteiskunnan infrastruktuurin ylläpidossa. (Pohjolainen, 2010)

4.2.7 Onnettomuuksien simuloiminen

Onnettomuuksien simuloimista erilaisten virhesuoritusten vuoksi käydään läpi esimerkin avulla. Espanjan turvallisuustutkintaviranomainen (CIAIAC), julkisti loppuraportin Patrian Diamond DA40 -koulukoneen laskeutumisvauriosta, joka tapahtui Espanjan Cordobassa tammikuussa 2020. Koulukoneella suoritettiin tapahtumien aikaan simuloitua moottorihäiriötä, jota ei CIAIAC:n mukaan toteutettu Patrian oman ohjeistuksen mukaisesti. Patria Pilot Training Oy:n käyttämä Diamond DA40 -koulukone (OH-DTF) joutui vakavaksi luokiteltavaan vaaratilanteeseen Espanjan Cordobassa 23. tammikuuta 2020. Koneessa oli tapahtumien aikaan lennonopettaja ja lento-oppilas. Koululennolle lentoonlähtöjä ja laskeutumisia harjoittelemaan lähtenyt miehistö nousi OH-DTF:llä ilmaan Cordoban kiitotieltä 03. Noin 380 metrin lähtökiidon päätteeksi juuri ilmaan nousun jälkeen lennonopettaja veti koneen moottoritehon tyhjäkäynnille 84 jalan eli noin 22 metrin korkeudessa simuloitun moottorihäiriön kuvaamiseksi. Kosketus kiitotien pintaan kuitenkin epäonnistui. Koulukoneen nokkateline petti ns. kolmelle pisteelle tehdyssä eli kaikkien laskutelineiden samanaikaisessa kosketuksessa kiitotiehen ja samalla myös potkuri otti kiinni kiitotiehen. Koulukone pomppasi takaisin ilmaan ja osui tämän jälkeen kiitotien pintaan päälaskutelineillään jatkaen matkaansa kohti kiitotien vastapään kynnystä. Lentokone pysähtyi lopulta ajautuen kiitotien reunalle.

Molemmat koneessa olleet selvisivät vammoitta ja poistuivat itse koneesta, joka oli CIAIAC:n mukaan merkittäviä vaurioita. Tapahtumaketju kesti tutkinnan mukaan tehojen vähentämisestä pysähdykseen noin 32 sekuntia. Turvallisuustutkinta sai arvokasta tietoa koneessa olleesta Garmin G1000 GPS -järjestelmästä. Turvallisuustutkinnan mukaan simuloitua moottorihäiriötä ei toteutettu voimassa olleen ohjeistuksen mukaisesti, joka olisi siten syy laskevaurioon. CIAIAC:n tekemän arvioinnin mukaan vaikuttaa siltä, ettei lennon-

opettaja toteuttanut simuloitua moottorihäiriötä lentokoulun toimintamenetelmien mukaisesti. Patrian toimintakäsikirjan mukaan simuloitu moottorihäiriö tulee toteuttaa aina vähintään 400 jalan korkeudesta maan pinnasta eikä kiitotien yläpuolella ja nopeuden tulee olla vähintään 88 solmua. Toimintamenetelmissä on myös tarkempia vaatimuksia lentosuunnalle lentokenttäalueen ulkopuolella tuulen suunnan huomioimisesta. (CIAIAC, 2020)

5 YHTEENVETO

Tutkielman tavoitteena oli käydä lävitse laskennan tarvetta, sekä sen mahdollistavan tekniikan rakenteita, suurteholaskennan käsitteitä ja tarpeita sekä sovel-lusalueita. Tutkielman toisessa luvussa otettiin historiallinen perspektiivi las-kennan ja laskutoimitusten tarpeeseen ja sen mahdollistavaan tekniikkaan. Tä-män kappaleen tarkoituksena oli herättää lukijan mielenkiintoa laskentaa koh-taan. Ensimmäiseen varsinaiseen tutkimuskysymykseen, ”Suurteholaskennan merkitys ja toteutus, mitä varten ja miten?”, vastattiin luvussa kolme. Tässä tuo-tiin esille käsitteitä sekä tekniikkaa, kuinka laskenta mahdollistetaan ja mihin kehitys suuntaa jatkossa. Supertietokoneet ja prosessoritekniikka ovat kehitty-neet nopeasti. Myös tietoliikennetekniikan kehitys mahdollistaa nopeiden las-kentaverkkojen muodostamisen. Nykyiset prosessoritekniikat ja ohjelmointioh-jelmat mahdollistavat suuren rinnakkaislaskennan potentiaalin, jota hyödynne-tään ympäri maailman. Uutena tekniikkana on kvanttifysiikan puolelta tullut kvanttietokone, jonka kapasiteetti on mahdollisesti aivan uudella tasolla van-haan tekniikkaan verrattuna. Jatkossa on mielenkiintoista seurata, kuinka yleiseksi tämä tekniikka muodostuu ja kuinka sitä voidaan hyödyntää.

Tutkielman toiseen kysymykseen, ”Kuinka tietokonepohjaista mallin-nusta voidaan hyödyntää tieteessä ja tekniikassa?”, vastattiin luvussa neljä, jos-sa pyrittiin avaamaan mallinnuksen perusteita sekä antamaan joitain esimerk-kejä mallinnuksen sovelluksista lukuisten joukosta. Tekniikan kehitys mahdol-listaa laajojen kokonaisuuksien mallintamisen nykyisillä tekniikoilla. Mallin-nuksen avulla säästetään sekä aikaa että resursseja ennen tuotannon tai käyt-töönnoton toteutuksia. Lukuisilla eri sovelluksilla voidaan ratkoa mallinnuksen matemaattisia kaavoja, jotka helpottavat suunnittelua aina tieteen- sekä teolli-suuden- että myöskin todellisuuden, kuten avaruuden mallintamisen, lentora-tojen laskentaan tai vaikkapa elokuvien virtuaalimallinukseen tai elävän elä-män virtuaalitodellisuuteen. Simulaatiot eri asioista aivotoiminnasta biologiaan ja avaruuteen sekä onnettomuuksiin, ovat ennakoivia ja käytettäviä, jotta suu-remmilta yllätyksiltä vältyttäisiin todellisuudessa.

Supertietokoneiden järjestelmärakenteita on määritelty yli puoli vuosisaa-taa ja niistä löytyy nykyään myös toteutuskaavioita, sekä toteutettuja koneita ympäri maailman. Kvanttietokoneen kehitys jatkuu ja myös Suomessa raken-netaan siitä ensimmäistä versiota. Kvanttilaskentaan liittyy vielä useita eri haas-teita muun muassa laskentatulosten varmentamisessa ja teknisessä toteutukses-sa. Laskentatehon määrä on joka tapauksessa vaihtelevien tietojen mukaan mo-ninkertainen perinteiseen supertietokoneeseen verrattuna. Johtopäätöksenä voidaan todeta matemaattisen mallinnuksen opetuksen tärkeyttä yliopistojen ja tieteellisen/teknisten alojen opiskelijoille, koska se antaa työelämässä tarvitta-via valmiuksia ja mahdollista matematiikan tarpeesta reaaliympäristössä, kuten teollisuudessa ja yhteiskunnassa. Kuuluisa fyysikko ja Nobel palkittu Richard Feynman totesi; ”Enkä ole tyytyväinen pelkkään klassiseen teoriaan perustuvaan analyysiin, sillä luonto ei ole klassinen piru vieköön, ja jos aikoo simuloida luontoa, on paras tehdä simulaatiosta kvanttimekaaninen, ja tämä on totisesti

ongelma, sillä se ei näytä kovinkaan helpolta” (Brown. J, 2001. s.102 mukaan). Katsauksen lopuksi voidaan tehdä tutkimuksen jatkokysymyksiä; Kuinka tarkkoja ja luotettavia mallinnuksen laskennan tulokset ovat? Riittävätkö matemaattiset resurssit hyödyntämään supertietokoneiden mahdollisuuksia? Mikä on kvanttietokoneen rooli tulevaisuudessa?

LÄHTEET

Alfthan, S. & Enkovaara, J. (2019). *Uutta puhtia laskennalliseen tieteeseen*. Arkhimedes (2019): 2.

Brown, J. & Pietiläinen, K. (2001). *Kvanttitietokone*. Helsinki, Terra cognita.

Cavazzoni, C. (2012). *Eurora: a european architecture toward exascale*. In *Proceedings of the Future HPC Systems: The Challenges of Power-Constrained Performance* (pp. 1-4). Haettu 21.2.2021 osoitteesta <https://dl.acm.org/doi/-10.1145/2322156.2322157>

Centre for Scientific Computing, CSC. (2021). *Suurteholaskennan hyödyt*. Haettu 15.2.2021 osoitteesta [https://www.csc.fi/-/suurteholaskennan hyödyt](https://www.csc.fi/-/suurteholaskennan-hyodyt)

CGI, (2020) Haettu 5.6.2020 osoitteesta <https://www.cgi.com/fi/fi/blogi/mika-on-lohkoketju>

CIAIAC, (2020). *Raportti: A-004/2020* (PDF). Haettu 20.2.2021 osoitteesta http://www.lentoposti.fi/uutiset/simuloidun_moottorih_iri_n_ep_onnistuminen_syyn_patrian_da40_koulukoneen_laskuvaurioon

Euston. (2021). *Hexadecimal system*. Haettu 2.3.2021 osoitteesta <https://www.euston96.com/en/hexadecimal-system/>

Flegg, G. (2002). *Lukujen historia*. Helsinki: Art House Oy.

Huang, W., Yang, CH., Chan, KW., Tanttu, T., Hensen, B., Leon, RCC., Fogarty, MA.

Hwang, JCC., Hudson, FE., Itoh, KM., Morello, A., Laucht, A., Dzurak, AS. (2019). *Fidelity benchmarks for two-qubit gates in silicon*. Nature. 2019 May; s.569. DOI: 10.1038/s41586-019-1197-0.

Joutsijoki, S. (2019). *Kvanttitietokoneiden vaikutus kryptografiaan*. Pro gradu -tutkielma. Tampereen Yliopisto.

Kankaala, K. (2000). *Uusi supertietokone CSC: Hen*. Arkhimedes 2 (2000).

- Karhu, M. (1984). *Supertietokoneet ja niiden käyttömahdollisuudet*. VTT Technical Research Centre of Finland.
- Kero, R. & Kujanen, H. (1989). *Kivikiroestä tietotekniikkaan*. Turun yliopiston historian laitos Julkaisuja n:o 21.
- McGregor, I. (2002). *The relationship between simulation and emulation*. In Proceedings of the Winter Simulation Conference (Vol. 2, pp. 1683-1688). IEEE. 2002, December
- Murgia, M. & Waters, R. (2019). *Google claims to have reached quantum supremacy*. Financial Times, September 20
- Mäyrä, J., (2017). *Kvanttitietokoneen toiminnan simulointi ja emulointi*. tiedekunta, I., Informaatioteknologia, Jyväskylä, U. o., yliopisto, J. & Tietotekniikka.
- Möttönen, M., Vartiainen, J. J., Bergholm, V., & Salomaa, M. M. (2004). *Transformation of quantum states using uniformly controlled rotations*. arXiv preprint quant-ph/0407010.
- Möttönen, M. (2019, 1. elokuu). *Tiedätkö, miten kvanttietokone toimii? – Lukemalla tämän saat selville, miksi kubitti voi olla nolla ja ykkönen yhtä aikaa*. Haettu 2.3.2021 osoitteesta <https://tekniikanmaailma.fi/tiedatko-miten-quanttietokone-toimii-lukemalla-taman-saat-selville-miksi-kubitti-voio-olla-nolla-ja-ykkonen-yhta-aikaa/tekniikan-maailma>.
- Nieminen, R. (2020, 17. heinäkuu). *Yksi maailman tehokkaimmista supertietokoneista aloittaa pian toimintansa Suomessa – Tällainen on LUMI, jonka laskentateho vastaa yli puolta miljoonaa MacBook Prota*. Haettu 2.3.2021 osoitteesta <https://tekniikanmaailma.fi/yksi-maailman-tehokkaimmista-supertietokoneista-aloittaa-pian-toimintansa-suomessa-tallinen-on-lumi-supertietokone-jonka-laskentateho-vastaa-yli-puolta-miljoonaa-macbook-prota>.
- Pohjolainen, S. (2010). *Matemaattinen mallinnus*. Helsinki: WSOYpro.
- Seidenberg, A. (1962) *The ritual origin of Counting, Archive for history of exact sciences* 2, s.1-40

Rasila, A. (2016), *Matriisilaskenta, Luento 20, Unitaarinen diagonalisointi*, Aalto-yliopisto. Haettu 5.3.2021 osoitteesta:
https://mycourses.aalto.fi/pluginfile.php/402614/mod_resource/content/2/MSA0002_120.pdf

Waldner, J. B., (2006). *Nano computers and Swarm Intelligence*, ISTE, ISBN 2746215160. Hermes Science, Ranska, s.157.

Yaga, D., Mell, P., Roby, N., & Scarfone, K. (2019). Blockchain technology overview. <https://doi.org/10.6028/NIST.IR.8202>

Yokota, R., Weiland, M., Keyes, D. & Trinitis, C. (2018). *High Performance Computing*:
33rd International Conference, ISC High Performance 2018, Frankfurt, Germany, s.24-28.