

УПРАВЛЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМИ ПРОЦЕССАМИ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

В.П.Ильин

- 1) Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
- 2) Новосибирский государственный университет

Двенадцатая международная
азиатская школа-семинар
“Проблемы оптимизации сложных систем”

Новосибирск,
12-16 декабря 2016 г.

Содержание

1. Что такое математическое моделирование?
2. Многомерная классификация задач ММ.
3. Технологическая цепочка ММ.
4. Стратегии и тактики распараллеливания
5. Архитектуры ППО
6. Инфраструктура вычислительного эксперимента как сложная система.
7. Инструменты управления вычислительными процессами.

Challenge Applications

Energetics

Materials

Nanotechnologies

Metallurgy

Machinery

Electronics

Chemistry

Biotechnology

Geophysics

Earth Sciences

National Security

Sociology

Medicine

Ecology

Agriculture

Economics

Mathematical Statements

- Navier–Stokes PDEs (Hydro-Gas-Dynamics)
- Lamé (Thermo - Elastoplasticity)
- Darcy (Multi-Phase Porous Media)
- Maxwell (Electro-Magnetism)
- Boltzman (Kinetics)
- Integral Equations (Various Application)
- Classical & Variational Formulations
- Hamiltonian Formalism (Dynamic Systems)

Formal Description of a Direct PDE and/or BIE Problems

$$L\vec{u} = \vec{f}(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in \bar{\Omega}, \quad 0 < t \leq T < \infty,$$

$$l\vec{u} = \vec{g}(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in \Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N, \quad \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}^0(\vec{x}),$$

$$L = A \frac{\partial}{\partial t} + \nabla B \nabla + C \nabla + D, \quad \bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma,$$

$$u = g_D, \quad x \in \Gamma_D; \quad D_N u + A_N \nabla_n u = g_N, \quad x \in \Gamma_N,$$

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{j=1}^M \bar{\Omega}_j, \quad \Gamma = \Gamma^e \cup \Gamma^i, \quad \Gamma^i = \bigcup \Gamma_{j,k}^i = \bigcup (\bar{\Omega}_j \cap \Omega_k)$$

+ **Integral + Variational Equations**

Goal Functional

$$\Phi_0(\vec{u}(\vec{X}, t, \vec{p}_{opt})) = \min_{\vec{p}} \Phi_0(\vec{u}(\vec{X}, t, \vec{p})),$$

Linear Constraints

$$p_k^{min} \leq p_k \leq p_k^{max}, \quad k = 1, \dots, m_l,$$

Functional Constraints

$$\Phi_l(\vec{u}(\vec{X}, t, \vec{p})) \leq \delta_l, \quad l = 1, \dots, m_2,$$

State Equation (Direct Problem)

$$L\vec{u}(\vec{p}) = \vec{f}, \quad \vec{p} = \{p_k\}$$

Local and Global Minimization

- **Isogeometric FEA**
- **Adapted Quasistructured Grid Generation**
- **Discontinuity Galerkin, FEM, FVM & BIE**
- **Multi-Scale Approaches**
- **Hamiltonians & Symplectic Algorithms**
- **Parallelism & Optimized DDM**
- **Finite Element Exterior Calculus**
- **Optimization & Inverse Problems**
- **Interdisciplinary Problems**

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА

- Формулировка модели
- Дискретизация задачи
- Аппроксимация уравнений
- Решение СЛАУ
- Решение СНАУ (нелинейные итерации)
- Интегрирование по времени
- Оптимизация параметров (обратные задачи)
- Постобработка и визуализация результатов расчета
- Анализ результатов и принятие решений

1. Масштабируемый параллелизм, гибридное программирование, интеграция ресурсов
2. Системы передачи сообщений (MPI)
3. Многопоточковые вычисления (OpenMP)
4. Векторизация операций (AVX)
5. Ускорители: GPU, Xeon, ПЛИС (FPGA)
6. Оптимизация кода и минимизация коммуникаций
7. Автоматизация распараллеливания?!

петафлопс \sim петабайт

“Программа = алгоритмы + структура данных”
Никлаус Вирт

Иерархическая общая + распределенная память

Intensive Data Computing (Data Mining)

Совмещение обменов с вычислениями

1. **Фундаментальные исследования:**
3-й путь познания
2. **САПР + ММ \Rightarrow конвергенция**
3. **Философия науки: онтология и гносеология**
(deep learning)
4. **ММ и технологическая сингулярность**
5. **Глобальное ММ и смена парадигм:**
3-я информационная революция

1. ТERA → ПЕТА → ЭКЗА (10⁹ ядер)
1997 2008 2019
2. Мировой кризис программирования
3. Автоматизация построения алгоритмов и их отображения на архитектуру МВС
4. Искусственный интеллект:
от палео- к неоинформатике
5. От ППП к интегрированным окружениям
(Open Source)
6. Кооперация и специализация (аутсорсинг)

1. Коммерческие и свободные ППП:
ANSYS, NASTRAN, FenICS, ЛОГОС, НИМФА...
2. Библиотеки программ: MKL, NETLIB,
SaadSoftware, PETSc
3. Интегрированные окружения:
MATLAB, OpenFOAM, DUNE, БСМ , INMOST
4. Algo Wiki - открытая энциклопедия
5. РОСФАП ?!

Технологические требования к ППО

1. **Расширяемость состав моделей и алгоритмов**
2. **Адаптация к эволюции компьютерных платформ**
3. **Переиспользование внешних программных продуктов**
4. **Компонентные технологии развития (COM, CCA)**
5. **Открытость к согласованному участию сторонних групп разработчиков
Software Research & High Performance
Research Community**

1. ВЦКП, DATA CENTER
2. Cloud Computing
3. Grid Technologies
4. Диспетчеризация задач
5. ССКЦ СО РАН, ВЦ НГУ и др.

УПРАВЛЕНИЕ НАЦИОНАЛЬНЫМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМИ РЕСУРСАМИ

**“Страна, желающая победить в конкуренции,
должна победить в вычислениях”.**

**Дебора Винс-Смит, Президент Совета
по конкурентоспособности США**

1. ЛОМОНОСОВ, МВЦКП, ВНИИЯФ (САРОВ)
2. СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ КОНСОРЦИУМ
УНИВЕРСИТЕТОВ
3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ РАН?!
4. AMAZONE, etc. commercial
5. МЕЖДУНАРОДНАЯ КООПЕРАЦИЯ

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

Г. И. Марчук

НАУКА УПРАВЛЯТЬ НАУКОЙ

Отвественные редакторы
академик В. П. Давыдов
доктор физ.-мат. наук К. П. Исаев



НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
2015



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ



THANK YOU FOR ATTENTION