

Artificial Intelligence Problems in Mathematical Modeling

В. П. Ильин

Институт вычислительной математики
и математической геофизики Новосибирский
государственный университет

Международная конференция
“Суперкомпьютерные дни в России”
Москва

23-24 сентября 2019 г.

Содержание

- Обзор литературы
- Прямые и обратные задачи моделирования
- Проблемы и архитектурные тенденции прикладного программного обеспечения (ППО)
- Функциональное наполнение методологических стадий и структура базовой системы (БСМ)
- Когнитивные технологии БСМ
- Технические требования к созданию ППО
- Компонентные принципы и технологии программирования
- Научно-организационные и инфраструктурные вопросы

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Asch, T. Moore, R. Badia, M. Beck, P. Beckman , T. Bidot, F. Bodin, F. Cappello, A. Choudhary , B. Supinski, E. Deelman, J. Dongarra, et. al. “Big data and extreme-scale computing: Pathways to Convergence-Toward a shaping strategy for a future software and data ecosystem for scientific inquiry”, The Internat. J. of High Performance Computing Application, vol. 32(4), pp. 434–479, 2018
2. X. Liao, K. Lu, C. Yang, et. al. “Moving from exascale to zettascale computing: challenges and techniques”, Front. Inform. Technol. Electron. Eng., vol. 19(10), pp. 1236–1244, 2018
3. V.P. Il'in, “Mathematical modelling, Part I: Continuous and discrete models” , Novosibirsk, SBRAS Publ., 2017
4. ANSYS [Online]. Available: [http:// www.ansys.com](http://www.ansys.com)
5. FEniCS [Online]. Available: <http://fenicsproject.org>
6. DUNE.[Online]. Available: <http://www.dune-project.org>

7. **INMOST: A toolkit for distributed mathematical modeling. [Online]. Available: <http://www.inmost.org>**
8. **V.P. Il'in. The Conception, Requirements and Structure of the Integrated Computational Environment. 2018. V. Voevodin and S. Sobolev (Eds.): RuSCDays, CCIS 965, 653-665, 2019**
9. **P. Giselsson, A. Rantzer (Editors), "Large-Scale and Distributed Optimization", Springer Lecture Notes in Mathematics, 2227, 2018**
10. **M. Delfour, J.-P. Zolesio, "Shape and Geometries. Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization", Philadelphia: SIAM Publ., 2011**
11. **A. Forrester, A. Sobester, A. Keane, "Engineering Design via Surrogate Modeling", A Practical Guide, JohnWiley and Sons, New York, 2008**
12. **Feoktistov A., Kostromin R., Sidorov I.A., Gorsky S.A. Development of Distributed Subject-Oriented Applications for Cloud Computing through the Integration of Conceptual and Modular Programming. In Proceed. of the 41st International Conference on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics, IEEE, pp. 256–251, 2018**

13. **Goncharov S.S., Sviridenko D.I. Logical Language of Description of Polynomial Computing. ISSN 1064-5624, Doklady Mathematics, vol. 99, N 2, pp. 1-4, 2019**
14. **Zagorulko Y.A., Borovikova O.I. An Approach for Realization of the content Patterns in Implementation of the Scientific Domains (in Russian). System Informatics. vol. 12, 27-39, 2018**
15. **Python Language. URL: <http://www.python.org>**
16. **Krasnov M.M. C ++ Template Metaprogramming in the Mathematical Physics Problems. Moscow, Keldysh IAM RAS, preprint, 2017**
17. **ALGOWIKI: URL: <https://algowiki-project.org>**
18. **Il'in V.P. How to Reorganize Computer Science and Technologies? (in Russian), Vestnik RAS. Moscow, vol. 89, N 3, pp. 232-242, 2019**

Формулировка междисциплинарной прямой начально-краевой задачи

$$\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma, \quad 0 < t \leq T < \infty :$$

$$L\vec{u} = \vec{f}(\vec{x}, t), \quad \vec{u} = \{u_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\} : \vec{f} = \{f_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\}.$$

$$l\vec{u} = \vec{g}(\vec{x}, t), \quad \vec{x} \in \Gamma, \quad \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}^0(\vec{x}), \quad u_\mu, f_\mu = u_\mu, f_\mu(\vec{x}, t),$$

$$L = A \frac{\partial}{\partial t} + \nabla B \nabla + C \nabla + D,$$

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N : u = g_D \quad x \in \Gamma_D;$$

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

Оптимизационная формулировка обратных задач

вектор оптимизируемых параметров модели

$$\vec{p} = (p_1, \dots, p_{m_0})$$

целевой (минимизируемый) функционал

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

линейные ограничения

$$m_1 + m_2 = m_0 : p_k^{min} \leq p_k \leq p_k^{max}, \quad k = 1, \dots, m_1$$

нелинейные (функциональные) ограничения

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

уравнение состояния (прямая задача)

$$\mathcal{L}\vec{u} = \mathcal{F}(\vec{x}, t)$$

Миссия математического моделирования

- вызовы суперкомпьютерной эволюции

-драматический рост мощностей суперкомпьютеров (закон Мура); - 10^8 – 10^{10} устройств арифметики и памяти - переход количества в качество (отказ от программных ограничений на число степеней свободы и количество вычислительных устройств, Intensive Data Computing);
- гетерогенные кластеры (GPU, PHI) и многоядерные процессоры с распределенной и иерархической общей памятью, минимизация энергозатратных коммуникаций (100мВт->20 мВт) ;

- суперзадачи пост-индустриальной эры

- междисциплинарные прямые и обратные задачи с реальными многомасштабными геометрическими структурами, контрастными материальными свойствами, нелинейной реологией и недоопределенными данными; - требования предсказательного моделирования с высоким разрешением расчетных данных, подтверждаемых натурными измерениями и технологиями валидации численных результатов;

- **новая вычислительная математика и нео-информатика**

- активное проникновение новых теоретических открытий в вычислительную математику (внешние дифференциальные и дискретные формы, симплектическая геометрия гамильтоновых систем, методы теории групп и графов, вычислительная топология и т.д.);

- высокопроизводительные вычислительно-информационные технологии масштабируемого параллелизма и гибридного программирования;

автоматическое построение математических моделей и алгоритмов;

- фабрика языков и компиляторов;

- искусственный интеллект - от палео-информатики к нео-информатике;

- **новый путь познания, наряду с теоретическими и экспериментальными изысканиями**

от фундаментальных исследований до оптимизации производственных процессов;

- **глобализация математического моделирования**

смена парадигмы ученых-теоретиков и экспериментаторов, появление новых массовых профессий—конечных пользователей технологий моделирования (моделлеров) в широких производственных, экономических и социальных сферах, а также в области национальной безопасности; качественный рост производительности труда и валового внутреннего продукта (ВВП).

Общесистемные проблемы и архитектурные тенденции прикладного программного обеспечения (ППО)

- классификация отраслевых задач, математических моделей и алгоритмов

Проблемы математического моделирования как общесистемной категории могут быть классифицированы по трем системам координат, практически не связанных друг с другом, в зависимости от профессиональной точки зрения заинтересованного субъекта. - *Отраслевая классификация* определяется конечной сферой приложений, и здесь могут быть названы самые разные области человеческой деятельности: энергетика, машиностроение, материаловедение, нанотехнологии, электроника, химические технологии, природопользование, медицина, социология, экономика и т.д. Приведенные наименования являются слишком общими и естественно, требуют своих внутренних спецификаций. Например, электроника бывает вакуумная или твердотельная, силовая или микро-, или СВЧ-электроника, фотоника и т.п.

Математические формулировки

- Систематизация задач моделирования по типам прикладных математических постановок в классических или обобщенных формулировках, описываемых системами дифференциальных и /или интегральных уравнений математической физики (как это традиционно называлось в XX-веке): уравнения Максвелла для электромагнитных явлений, система уравнений Навье-Стокса, описывающая гидро-газодинамические течения уравнения Ламе для упруго-пластических деформаций, уравнения Дарси для многофазных процессов в пористых средах, кинетические уравнения Больцмана для плазмы, гамильтоновы динамические системы, уравнения квантовой механики и т.д. Эти же постановки могут классифицироваться по своим формальным типам в теории начально-краевых задач для дифференциальных и /или интегральных уравнений. Важно отметить, что фактически для каждой естественно-научной проблемы может формулироваться иерархическая система математических моделей, в которых по мере их усложнения учитываются все более тонкие физические или другие эффекты. Естественно, что этапы численного решения практических задач должны предваряться исследованиями теоретических свойств искомого решения (существование и единственность, корректность и устойчивость, и т.п.).

● **ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ, МЕТОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ.**

Богатое разнообразие математических задач порождает еще большее многообразие методов их решения. Дискретизация непрерывных постановок осуществляется на последовательностях адаптивных сеток с локальными сгущениями в окрестностях сингулярности решений. Современные аппроксимационные подходы (методы конечных объемов и элементов, спектральные алгоритмы, численные интеграторы и др.) базируются на компактных вычислительных схемах высокого порядка точности, удовлетворяющих основным законам сохранения. Ресурсоемкие методы вычислительной алгебры реализуются с помощью высокопроизводительных параллельных технологий средствами гибридного программирования на гетерогенных вычислительных системах с распределенной и иерархической общей памятью. Решение обратных задач осуществляется алгоритмами условной минимизации целевых функционалов при заданных линейных и/или нелинейных ограничениях, на основе многократного решения параметризованных прямых постановок. Сочетание универсальности и эффективности подходов обеспечивается избыточностью вариантов алгоритмов с возможностью выбора наиболее экономичной версии, а их практическая робастность проверяется систематическим тестированием на представительных наборах методических примеров.

Обзор развития традиционных программных приложений

Прикладное программное обеспечение (ППО) с организационной точки зрения делится на общедоступное, или открытое (Open Source), и на закрытое, или коммерческое. Однако нас больше интересует его классификация по функционально-методологическим признакам, которая определяет три основных типа ППО.

- *Пакеты прикладных программ (ППП)* - это проблемно-ориентированное обеспечение конкретного класса (или классов) практических задач, включающего комплексную поддержку всех основных стадий моделирования и относительно слабо зависящее от внешних программных продуктов. Примеры высоко развитых и широко распространенных ППП-NASTRAN, ANSYS, FreeFEM, NGSolve, FlowVision.

- *Библиотеки алгоритмов и программ* представляют собой методо-ориентированное обеспечение, содержащее достаточно представительный набор методов для решения определенного математического класса задач. Примеры: "всеобъемлющая" библиотека NETLIB, библиотеки алгебраических методов MKL INTEL, EIGEN, SPARSE KIT.
- *Технологические инструментарии* по структуре могут также быть библиотечного типа, но они больше связаны с информационным обеспечением соответствующих вычислительных процессов. Примеры: генераторы сеток NETGEN, GMESH, графические пакеты PARAVIEW, VISUAL STUDIO и т.д.

В классификацию ППО мы не включаем системное программное обеспечение (СПО), а также такие самодостаточные продукты, как САПРовские разработки (CAD, CAM, CAE, PLM), имеющие свой традиционный рынок, но проявляющие тенденции интеграции с проблемами моделирования.

Концепция интегрированных вычислительных окружений (ИВО)

Идеология ИВО заключается в создании открытой инструментальной среды, ориентированной на автоматизированное построение вычислительных моделей, алгоритмов и технологий, классифицированных по всем основным стадиям моделирования широкого круга процессов и явлений.

Примерами таких проектов являются Open FOAM, DUNE (Distributed Unified Numerical Environment), MATLAB (коммерческий продукт университетской направленности, имеющий свою открытую версию OCTAVE), INMOST (разработка ИВМ РАН), а также разрабатываемая в ИВМиМГ СО РАН базовая система моделирования БСМ, рассчитанная на поддержку деятельности как разработчиков ППО, так и широкого круга конечных пользователей с разнообразной профессиональной подготовкой.

Функциональное наполнение и структура базовой системы моделирования (БСМ)

Ядро БСМ состоит из автономно разрабатываемых программных блоков, поддерживающих соответствующие стадии моделирования и взаимодействующих между собой и с внешним миром посредством согласованных структур данных. *Геометрическое и функциональное моделирование* обеспечивается модулем VORONOI, реализуемым на базе отечественной САПР-овской разработки ГЕРБАРИЙ. Содержание данной стадии заключается в описании заданной математической модели поставленной задачи для последующего автоматизированного формирования вычислительно-информационной модели, которая в итоге представляется исходным или исполняемым программным кодом. Результатом выполнения данного этапа является формирование геометрической и функциональной структур данных (ГСД и ФСД), обеспечивающих информационное согласование с типовыми САД-овскими продуктами

Генерация сеток поддерживается библиотекой DELAUNAY, которая включает ряд алгоритмов для построения специальных дискретизаций в характерных подобластях, а в целом предназначена для формирования квазиструктурированных (гибридных) сеток с возможностями использования разных типов элементов, или объемов, в различных сеточных подобластях, при активном использовании таких известных разработок, как NETGEN или GMESH. Результатом работы данного этапа является сеточная структура данных (ССД), которая в совокупности с ГСД и ФСД полностью отображает решаемую задачу на дискретном уровне. В целях обеспечения масштабируемого распараллеливания формирование сеточных подобластей должно осуществляться распределенным образом.

Аппроксимация уравнений реализуется в БСМ в рамках библиотеки CHEBYSHEV, осуществляющей поэлементное вычисление локальных матриц и сборку глобальной матрицы (при необходимости - в распределенном по MPI-процессам варианте) на разных типах сеточных ячеек для решаемых с помощью МКО или МКЭ различных порядков точности краевых задач. Исходной информацией здесь служит совокупность ГСД, ФСД и ССД, а итогом выполнения данного этапа является алгебраическая структура данных (АСД), представляющая сгенерированную систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в разреженных сжатых форматах (например, в CSR—Compressed Sparse Row).

Решение алгебраических задач в рамках БСМ поддерживается комплексом параллельных алгоритмов из библиотеки KRYLOV, представляющей собой интегрированную вычислительную среду для реализации широкого класса СЛАУ на базе современных многосеточных подходов, а также итерационных алгебро-геометрических методов декомпозиции в подпространствах Крылова, ускоряемых с помощью различных вариантов малоранговых аппроксимаций исходной матрицы. Масштабируемое распараллеливание на гетерогенных кластерах достигается средствами гибридного программирования с помощью систем MPI, OpenMP, CUDA и векторизации арифметических операций. Эффективное функционирование модулей основывается на активном использовании экономичных функций библиотеки MKL INTEL, а также допускает использование других внешних алгебраических решателей или вспомогательных вычислительных инструментов.

Когнитивные технологии БСМ (deep bearing, семантическое моделирование)

- Операции с геометрическими и дифференциальными формами
- Самообучающиеся генераторы сеток
- Сбалансированные декомпозиции областей и предобусловления графов
- Аналитические (формульные) вкладки
- Анализ функциональных результатов
- Принятие решений и планирование экспериментов

Технические требования к созданию ИВО

- Гибкая расширяемость состава моделей решаемых междисциплинарных проблем, а также методов решения прямых и обратных задач, без программных ограничений на число степеней свободы и на количества используемых вычислительных процессоров и/или ядер.
- Адаптируемость к эволюции компьютерных архитектур. Компонентные технологии обеспечения согласованности внутренних и внешних межмодульных интерфейсов.
- Универсальные и конвертируемые структуры данных, согласованные с имеющимися распространенными форматами и поддерживающие возможности переиспользования внешних программных продуктов

- Многоязыковость и кросс-платформенность программного функционального наполнения, открытость к согласованному участию в проекте различных групп разработчиков.
- Высокая производительность программного кода с масштабируемым параллелизмом на основе средств гибридного программирования на гетерогенных МВС с распределенной и иерархической общей памятью.
- Наличие разнообразных пользовательских интерфейсов с ориентацией на широкое применение в различных производственных сферах.

Сформулированные требования призваны обеспечить длительный жизненный цикл проекта, а также такие противоречивые качества, как эффективность, универсальность, высокую производительность и широкую востребованность.

Проблемы и алгоритмы масштабируемого распараллеливания вычислений

- Возможности грубых оценок производительности и эффективности распараллеливания вычислительных процессов, а также использования инструментов мониторинга (тьюнинга) загрузки устройств.
- Отсутствие математической модели параллельных вычислений на гетерогенной МВС, а также эффективных систем имитационного моделирования работы суперкомпьютера
- Наличие академических проектов при фактическом отсутствии производственных программных средств автоматического распараллеливания алгоритмов
- Методологии экспериментального исследования эффективности и производительности конкретных параллельных реализаций алгоритмов. Выработка практических рекомендаций

Компонентные принципы , инструменты и технологии программирования

- Автоматизация построения алгоритмов и их отображение на архитектуру ЭВМ
- Наукоемкие инструментари: Sparse Blas, MAPLE, METIS.
- Стили программирования:
модульное, сборочное, фрагментарное,
объектно-ориентированное.
- Компонентные технологии: COM/DCOM, CCA (Common Component Architecture) , SIDL (Scientific Interface Definition Language)

Цель - кардинальное повышение производительности
программирования.

Системное наполнение ИВО

- Средства автоматизации для верификации, вариации и тестирования различных типов алгоритмов, в том числе в разных внешних окружениях.
- Конфигурационное управление многоверсионных реализаций программных модулей
- Управление вычислительным процессом и организация расчетных сеансов, в том числе в облачных технологиях.
- Автоматизация построения и распараллеливания высокопроизводительных алгоритмов, их отображение на архитектуру ЭВМ.
- Конкретизация и поддержка стилей программирования: модульное, сборочное, фрагментарное, объектно ориентированное, функциональное
- Компонентные технологии для поддержки многоязыковости и кросс-платформенности проекта

Научно-организационные и инфраструктурные вопросы

Грядущая глобализация математического моделирования ставит ряд новых кардинальных проблем:

- Организация фундаментальных интеграционных исследований с целью создания и развития академического и университетского прототипа ИВО
- Образование инфраструктуры и поддержка взаимодействия академических и профессиональных коллективов по разработке производственного интегрированного вычислительного окружения для математического моделирования
- Создание инфраструктуры вычислительного сообщества разработчиков и пользователей ППО.
- Формирование системы образования и подготовки массовых профессий математического моделирования на базе суперкомпьютерной грамотности.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ



THANKS FOR ATTENTION