

MODELIAVIMAS IR HPC: FIZIKINIS, MATEMATINIS, INFORMATIKOS IR SKAITMENINIS MODELIAVIMAI – DISKUSIJA

Raimondas Čiegis ir MMK

Vilniaus Gedimino technikos universitetas
e-mail: rc@vgtu.lt

Spalio 1 d., 2024, Vilnius

Pradėsime diskusijų ciklą įvairiais šiuolaikinės skaičiavimo matematikos klausimais.

Pradėsime diskusijų ciklą įvairiais šiuolaikinės skaičiavimo matematikos klausimais.

Diskusijos menas yra labai svarbus moksliniame gyvenime, o ir gyvenime aplamai, todėl reikia skatinti diskutavimo įgūdžių tobulinimą.

Pradėsime diskusijų ciklą įvairiais šiuolaikinės skaičiavimo matematikos klausimais.

Diskusijos menas yra labai svarbus moksliniame gyvenime, o ir gyvenime aplamai, todėl reikia skatinti diskutavimo įgūdžių tobulinimą.

Šį kartą aptarsime skirtingus modeliavimo aspektus tampriai susietoje gamtos mokslų tematikoje.

Pradėsime diskusijų ciklą įvairiais šiuolaikinės skaičiavimo matematikos klausimais.

Diskusijos menas yra labai svarbus moksliniame gyvenime, o ir gyvenime aplamai, todėl reikia skatinti diskutavimo įgūdžių tobulinimą.

Šį kartą aptarsime skirtingus modeliavimo aspektus tampriai susietoje gamtos mokslų tematikoje.

Čia stebime ypač augantį skaitmeninio (digital) modeliavimo (simulation) mastą, pažiūrėkime kaip dažnai visur skamba raktinis terminas AI (dirbtinis intelektas).

Bet kažką naujo dažniausiai galime apibrėžti tik lygindami su jau susiformavusiomis teorijomis. Diskusijoje aptarsime populiarius fizinius (nebūtinai fizikinius) procesus: gravitaciją, elektromagnetinius laukus, pirminius skaičius, NP sudėtingumo uždavinius.

Bet kažką naujo dažniausiai galime apibrėžti tik lygindami su jau susiformavusiomis teorijomis. Diskusijoje aptarsime populiarius fizinius (nebūtinai fizikinius) procesus: gravitaciją, elektromagnetinius laukus, pirminius skaičius, NP sudėtingumo uždavinius.

Kur čia randame vietą matematikai (dažniausiai kaip svarbiam, labai svarbiam arba net svarbiausiam įrankiui)?

Kita, ne mažiau svarbi žinia, kad šių naujų naudų negalime tikėtis be unikalių HPC pažadų (taip, tų pažadų per paskutinius 12 mėnesių išgirdome tikrai daug, smagumėlis).

Pradėkime nuo modeliavimo tikslų aptarimo.

Pradėkime nuo modeliavimo tikslų aptarimo.

Mus domina kažkurie svarbūs fiziniai procesai (fizika, chemija, biologija, inžinerija). Tai įvardinu kaip **Gamtos** dalį.

Pradėkime nuo modeliavimo tikslų aptarimo.

Mus domina kažkurie svarbūs fiziniai procesai (fizika, chemija, biologija, inžinerija). Tai įvardinu kaip **Gamtos** dalį.

Gamta visai neprivalo garantuoti, kad procesai bus nesunkiai suprantami, aprašomi mums suprantamos logikos aparatu, tinkama kalba (pvz. egzistuojančiu matematinio aparatu). Ji gali labai rezervuoti ir nenoriai atsakyti į mūsų klausimus, net jei sugalvojame tokius ir bandome juos užduoti.

Pradėkime nuo modeliavimo tikslų aptarimo.

Mus domina kažkurie svarbūs fiziniai procesai (fizika, chemija, biologija, inžinerija). Tai įvardinu kaip **Gamtos** dalį.

Gamta visai neprivalo garantuoti, kad procesai bus nesunkiai suprantami, aprašomi mums suprantamos logikos aparatu, tinkama kalba (pvz. egzistuojančiu matematinio aparatu). Ji gali labai rezervuoti ir nenoriai atsakyti į mūsų klausimus, net jei sugalvojame tokius ir bandome juos užduoti.

Taigi geriausia analogija yra sietina su kriptografijos uždaviniais: kažkokius faktus žinome, daug didesnė tikimybė, kad didesnės dalies faktų nežinome. Taigi reikia sukurti, parinkti, atspėti, kaip aprašyti mus dominantį procesą.

Ir čia dažniausiai pasitelkiame matematinį aparatą, matematikos kalbą. Bet šis etapas tikrai nėra matematikų darbo sritis, santykinai šią veiklą skiriame fizikai (fizikinei-chemijai, biologijai, mechanikai).

Ir čia dažniausiai pasitelkiame matematinį aparatą, matematikos kalbą. Bet šis etapas tikrai nėra matematikų darbo sritis, santykinai šią veiklą skiriame fizikai (fizikinei-chemijai, biologijai, mechanikai).

Faktiškai tai svarbiausia modeliavimo proceso dalis, bet tikrai dar ne pabaiga ir dažniausiai netgi ne pati didžiausia darbo dalis.

Pasiekėme svarbią kryžkelę. Turime modelį (jis netgi gali būti užrašytas matematinėmis lygtimis)

Pasiekėme svarbią kryžkelę. Turime modelį (jis netgi gali būti užrašytas matematinėmis lygtimis)

Natūralu, kad norisi mokėti atsakyti į klausimą, ar modelis adekvačiai (tiksliai) aprašo Gamtos procesą.

Pasiekėme svarbią kryžkelę. Turime modelį (jis netgi gali būti užrašytas matematinėmis lygtimis)

Natūralu, kad norisi mokėti atsakyti į klausimą, ar modelis adekvačiai (tiksliai) aprašo Gamtos procesą.

Argi ne taip mus mokė univesritete, o dabar jau mes mokome studentus?

Pasiekėme svarbią kryžkelę. Turime modelį (jis netgi gali būti užrašytas matematinėmis lygtimis)

Natūralu, kad norisi mokėti atsakyti į klausimą, ar modelis adekvačiai (tiksliai) aprašo Gamtos procesą.

Argi ne taip mus mokė univesritete, o dabar jau mes mokome studentus?

Uždavinys suformuluotas: ar jis turi sprendinį, koks yra sprendinio tikslumas, kiek jis skiriasi nuo Gamtos procesų, kuriuos norime modeliuoti?

Šią išvadą norime gauti bent jau formaliai, jeigu negalime išreikštiniu būdu sukonstruoti sprendinio.

Atsakymas: toks klausimas yra **neteisingas**. Ar sukurtasis teorinis modelis yra tinkamas Gamtos modelis **nėra Matematikos klausimas/uždavinys**.

Atsakymas: toks klausimas yra **neteisingas**. Ar sukurtasis teorinis modelis yra tinkamas Gamtos modelis **nėra Matematikos klausimas/uždavinys**.

Turime (galime) tik tikrinti ar tokio modelio PROGNOZĖS patvirtinamos eksperimentuose.

Atsakymas: toks klausimas yra **neteisingas**. Ar sukurtasis teorinis modelis yra tinkamas Gamtos modelis **nėra Matematikos klausimas/uždavinys**.

Turime (galime) tik tikrinti ar tokio modelio PROGNOZĖS patvirtinamos eksperimentuose.

Gavus naujus eksperimentinius duomenis, kurie nesutampa su Gamtos modelio prognoze turime keisti (modifikuoti, patikslinti) sukurtąjį modelį. Ir vėl kartoti visą modeliavimo ciklą.

Parinktasis (atspėtas, susapnuotas ar logiškai išprotautas) matematinis modelis jau apibrėžia savarankšką matematinį uždavinį. Jo sprendimui naudojame visas šiuolaikinės matematikos žinias, skaičiavimo įrankius (taip pat ir HPC galimybes).

Gravitacija

Kokia situacija buvo susidariusi iki Niutono darby:

Gravitacija

Kokia situacija buvo susidariusi iki Niutono darbų:

Buvo sukaupta daug eksperimentinių faktų, paminėsime tik keletą:

1. Žmogus, stalas, spinta gali tvarkingai ir stabiliai stovėti ant Žemės.
2. obuolys visada krenta nuo medžio žemyn.
3. Išmestas į viršų kūnas skrieja paraboline trajektorija ir nukrenta ant Žemės.
4. Trys Keplerio dėsniai labai tiksliai aprašo planetų judėjimą apie Saulę.

Koks modelis (geriausia, jei jis bus užrašytas matematinėmis lygtimis) gali sėkmingai paaiškinti visus tokius faktus ir generuoti naujas netrivialias prognozes?

Niutono teorija:

Niutono teorija:

Niutono visuotinės traukos dėsnis sako, kad bet kokie du Visatos kūnai veikia vienas kitą jėga, kurios modulis yra:

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}.$$

Niutono teorija:

Niutono visuotinės traukos dėsnis sako, kad bet kokie du Visatos kūnai veikia vienas kitą jėga, kurios modulis yra:

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}.$$

Panaudojęs šį traukos dėsnį ir savo atrastą antrą poveikio dėsnį, Niutonas gavo dinaminį masės traukos proceso modelį

$$m_1 \frac{d^2 X}{dt^2} = G \frac{m_1 m_2}{r^2}.$$

Gavome tvarkingą ir nelabai sudėtingą modelį, kuris bendresniu kelių kūnų sąveikos atveju yra aprašomas netiesinių antrosios eilės paprastųjų diferencialinių lygčių sistema

(valio, pagaliau tvarkingas matematinis uždavinukas).

Gavome tvarkingą ir nelabai sudėtingą modelį, kuris bendresniu kelių kūnų sąveikos atveju yra aprašomas netiesinių antrosios eilės paprastųjų diferencialinių lygčių sistema

(valio, pagaliau tvarkingas matematinis uždavinukas).

Tokius uždavinius sprendžia mūsų studentai (o ir ChatGPT nesunkiai susidoroja su tokiu darbu).

Gavome tvarkingą ir nelabai sudėtingą modelį, kuris bendresniu kelių kūnų sąveikos atveju yra aprašomas netiesinių antrosios eilės paprastųjų diferencialinių lygčių sistema

(valio, pagaliau tvarkingas matematinis uždavinukas).

Tokius uždavinius sprendžia mūsų studentai (o ir ChatGPT nesunkiai susidoroja su tokiu darbu).

Bet Niutono laikais diferencialinio skaičiavimo metodai dar nebuvo sukurti ir Niutonui teko pačiam tapti matematiku.

Jis vėl pademonstravo neeilinius gebėjimus (genijus yra genijus).

Dar pats Niutonas žinojo pagrindinį traukos dėsnio trūkumą. Pagal Niutono teoriją jėga veikia **akimirksniu**.

Dabar žinome, kad ribinis greitis yra šviesos greitis.

Dar pats Niutonas žinojo pagrindinį traukos dėsnio trūkumą. Pagal Niutono teoriją jėga veikia **akimirksniu**.

Dabar žinome, kad ribinis greitis yra šviesos greitis.

Niutonas neturėjo ir paaiškinimo, kodėl dėsnis yra būtent toks.

Beje, tada jam būtų tapę aišku, kad traukos jėga veikia tik baigtiniu greičiu.

Planetų orbitų atveju perihelis apibrėžia planetos orbitos arčiausią nuo Saulės tašką.

Planetų orbitų atveju perihelis apibrėžia planetos orbitos arčiausią nuo Saulės tašką.

Eksperimentiniai duomenys rodo, kad visų Saulės sistemos planetų periheliai nėra fiksuoti, kiekvieno apsisukimo eigoje jie keičia savo vietą (t.y. sukasi ir elipsinės trajektorijos pagrindinė ašis).

Planetų orbitų atveju perihelis apibrėžia planetos orbitos arčiausią nuo Saulės tašką.

Eksperimentiniai duomenys rodo, kad visų Saulės sistemos planetų periheliai nėra fiksuoti, kiekvieno apsisukimo eigoje jie keičia savo vietą (t.y. sukasi ir elipsinės trajektorijos pagrindinė ašis).

Tokio reiškinio pagrindinė priežastis yra kitų (kaimyninių) planetų poveikis vienai atskirai planetai, skriejančiais aplink Saulę.

Planetų orbitų atveju perihelis apibrėžia planetos orbitos arčiausią nuo Saulės tašką.

Eksperimentiniai duomenys rodo, kad visų Saulės sistemos planetų periheliai nėra fiksuoti, kiekvieno apsisukimo eigoje jie keičia savo vietą (t.y. sukasi ir elipsinės trajektorijos pagrindinė ašis).

Tokio reiškinio pagrindinė priežastis yra kitų (kaimyninių) planetų poveikis vienai atskirai planetai, skriejančiais aplink Saulę.

Svarbi žinia, kad Niutono pateiktas modelis labai tiksliai modeliuoja šį reiškinį Saulės sistemoje visoms planetoms išskyrus Merkurijų.

100 metų eksperimentinių duomenų analizė 1882 metais parodė, kad Merkurijaus perihelio pokytis lyginant su Niutono modelio prognoze skiriasi 43 arc sekundėmis.

100 metų eksperimentinių duomenų analizė 1882 metais parodė, kad Merkurijaus perihelio pokytis lyginant su Niutono modelio prognoze skiriasi 43 arc sekundėmis.

Alberto Einšteino pasiūlytas bendrosios reliatyvumo teorijos modelis prognozavo būtent tokį perihelio pokytį. Tai tapo stipriu argumentu tvirtinti, kad naujasis modelis yra tikslesnis.

100 metų eksperimentinių duomenų analizė 1882 metais parodė, kad Merkurijaus perihelio pokytis lyginant su Niutono modelio prognoze skiriasi 43 arc sekundėmis.

Alberto Einšteino pasiūlytas bendrosios reliatyvumo teorijos modelis prognozavo būtent tokį perihelio pokytį. Tai tapo stipriu argumentu tvirtinti, kad naujasis modelis yra tikslesnis.

Šiame modelyje pateiktas traukos jėgų modelis remiasi keturmačio erdvėlaikio iškreivimu ir jame sąveika veikia tik šviesos greičiu. Modelyje esmingai naudojama tenzorių teorija, ne-Euklidinė geometrija. Taigi skaičiavimo algoritmai yra daug, daug, daug sudėtingesni, nei Niutono modelio atveju. Priminsime, kad pagal Niutono teoriją jėga veikia **akimirksniu**.

Visgi ir A. Einšteinas savo modelį konstravo kaip euristiką (panašiai kaip ir specialiosios reliatyvumo teorijos atveju).

Visgi ir A. Einšteinas savo modelį konstravo kaip euristiką (panašiai kaip ir specialiosios reliatyvumo teorijos atveju).

Šio dėsnio išvedimą iš pirminių fizikinių prielaidų pirmasis pateikė garsusis matematikas D. Hilbertas (naudojo variacinius principus), o vėliau ir fizikas Ričardas Feynman'as.