

Sekcja Nauk Obliczeniowych
Komitet Informatyki
Polska Akademia Nauk
Warszawa, 12 lutego 2010

Szkic raportu

Badania bazujące na Symulacji Komputerowej (**BSK**)



Symulacja komputerowa jako
ważny element współczesnej metodologii
prowadzenia badań naukowych

Tadeusz Burczyński
Michał Kleiber



Plan raportu

Wstęp

1. Wprowadzenie
2. BSK jako narodowy priorytet dla nauki i techniki
3. Efekty i korzyści ze stosowania BSK
4. Wyzwania, bariery i możliwości BSK
5. Edukacja i kształcenie młodych kadr naukowych w zakresie BSK
6. Wnioski
7. Główne zalecenia raportu



Wstęp

Raport zawiera :

- wnioski, rekomendacje, zalecenia związane z nowym spojrzeniem na znaczenie nauk obliczeniowych w rozwoju nauki i techniki w Polsce,
- wskazówki, wnioski oraz zalecenia, które są kluczowe dla przyspieszenia rozwoju **Badań bazujących na Symulacji Komputerowej (BSK)**,
- identyfikację wybranych obszarów, w których BSK mogą odgrywać szczególną rolę we wspieraniu rozwoju w zakresie zdrowia, nauk technicznych, bezpieczeństwa oraz konkurencyjności technologicznej Polski,
- próbę określenia wyzwań i potencjalnych korzyści z rozwoju BSK,
- zidentyfikowane bariery rozwoju BSK.

Pytanie:

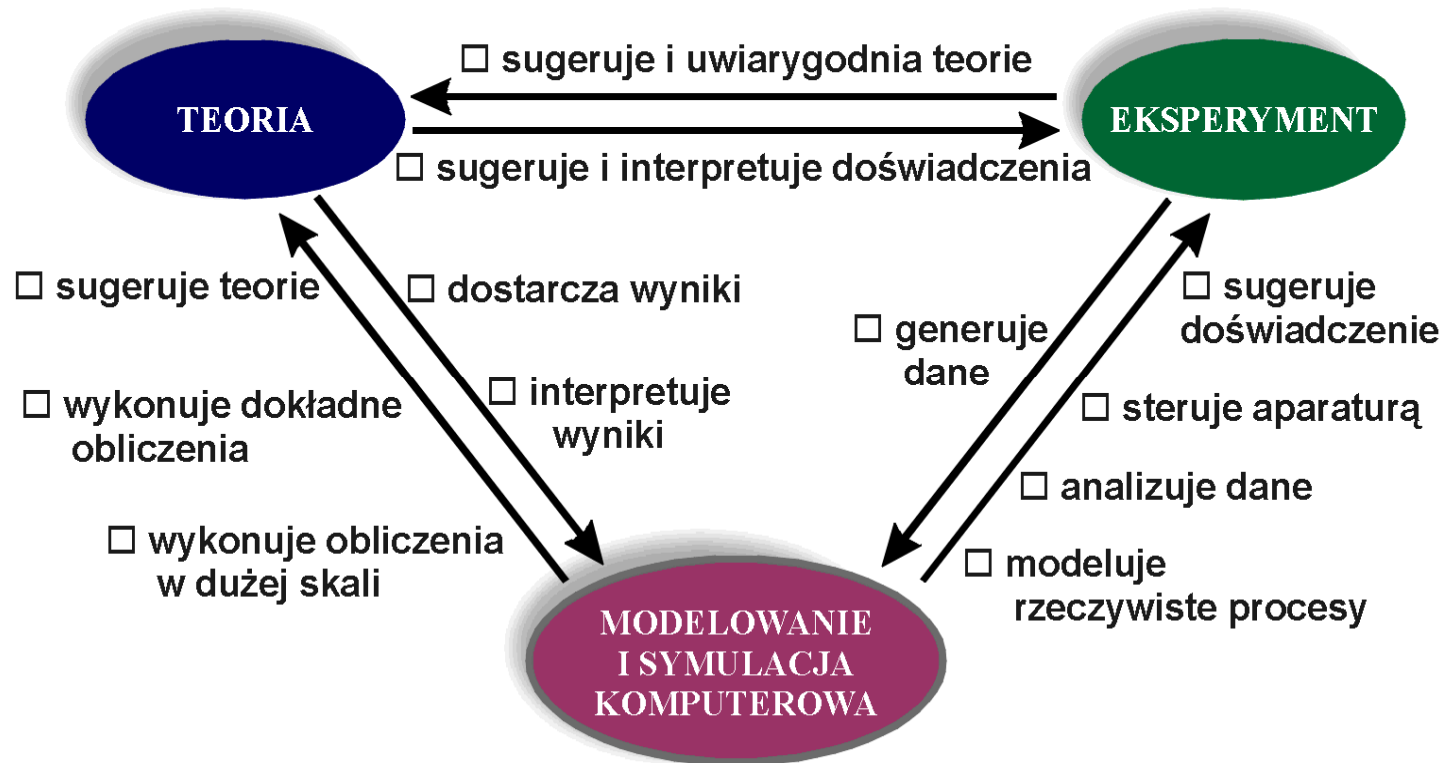
w jaki sposób można promować BSK wśród społeczności akademickiej, w przemyśle, laboratoriach oraz agencjach rządowych, a zwłaszcza w tych, które są odpowiedzialne za strategię i finansowanie badań naukowych, tzn. w MNiSW, PAN, NCBR, FNP oraz w niedalekiej przyszłości w NCN.



1. Wprowadzenie

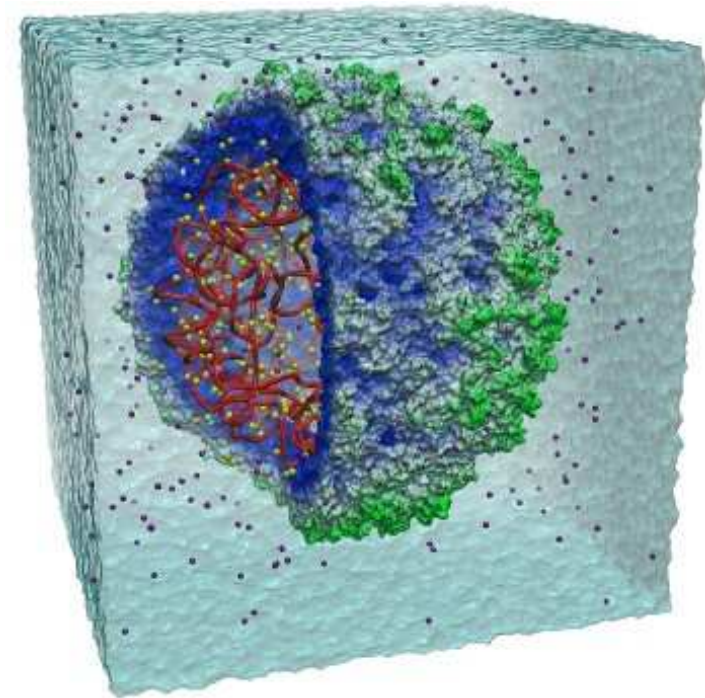
Pojęcie słowa „*symulacja komputerowa*” odnosi się do stosowania modeli obliczeniowych w analizie i predykcji procesów fizycznych, chemicznych lub zachowań systemów biologicznych, społecznych i technicznych. Rozwój *symulacji komputerowej* jest rezultatem rozwoju wiedzy oraz metodologii nauk matematycznych, przyrodniczych, społeczno-ekonomicznych, informacyjnych i technicznych. Symulacja komputerowa wraz z rozwojem i szerokim zakresem zastosowań, staje się w ostatnich latach potężnym narzędziem, mogącym zrewolucjonizować naukę i technikę w XXI wieku.

Trzy filary współczesnej nauki

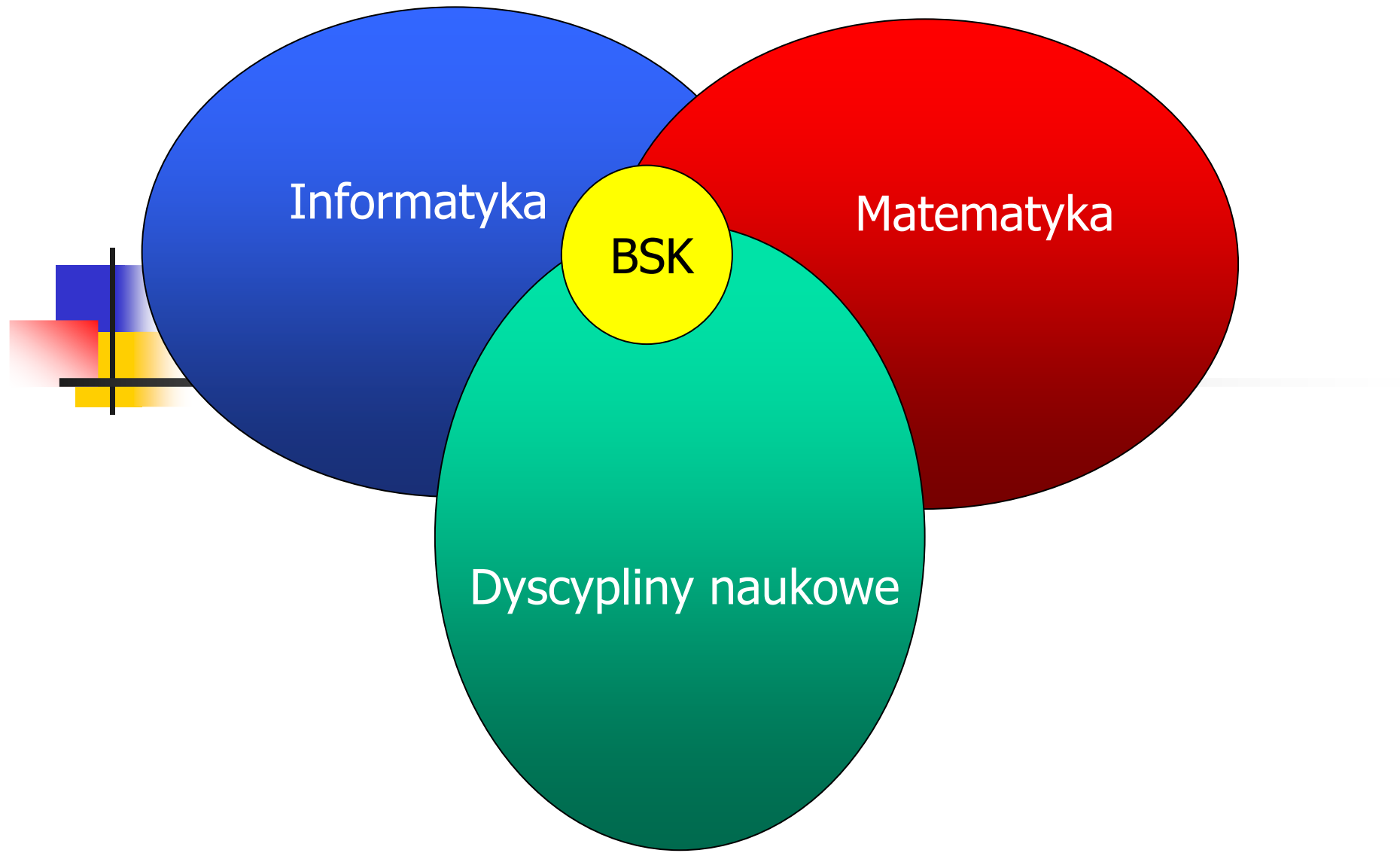


BSK jako meta-dyscyplina

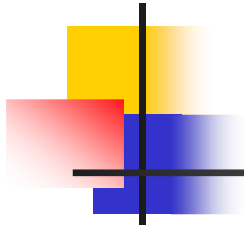
- Dostarcza naukową i matematyczną podstawę dla symulacji komputerowej zjawisk fizycznych, chemicznych oraz zachowań systemów biologicznych, społecznych i technicznych
- Spaja wiedzę i techniki tradycyjnych obszarów inżynierii: elektrycznej, mechanicznej, lądowej, chemicznej, kosmicznej jądrowej, biomedycznej i materiałowej z wiedzą i technikami z takich obszarów jak informatyka (nauki informacyjne), matematyka oraz nauki fizyczne i społeczne



BSK jako rodzaj interdyscyplinarnej meta-dyscypliny



Badania bazujące na Symulacji Komputerowej - BSK



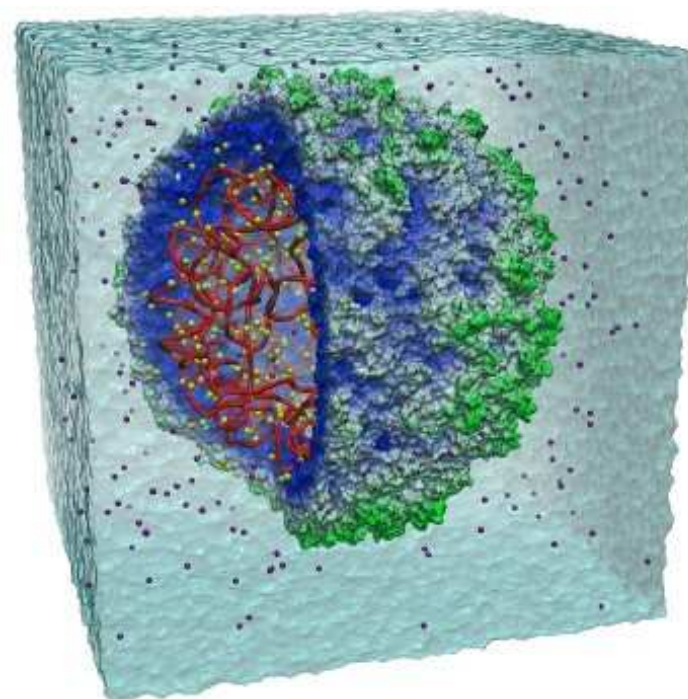
Badania, w których dominującą metodą uzyskiwania nowych rezultatów poznawczych lub aplikacyjnych jest użycie technik komputerowych już istniejących lub opracowanych

przy czym:

techniki komputerowe nie tylko wspomagają rozwiązywanie tradycyjnie postawionych problemów, ale także tworzą bazę umożliwiającą stawianie zupełnie nowych problemów badawczych

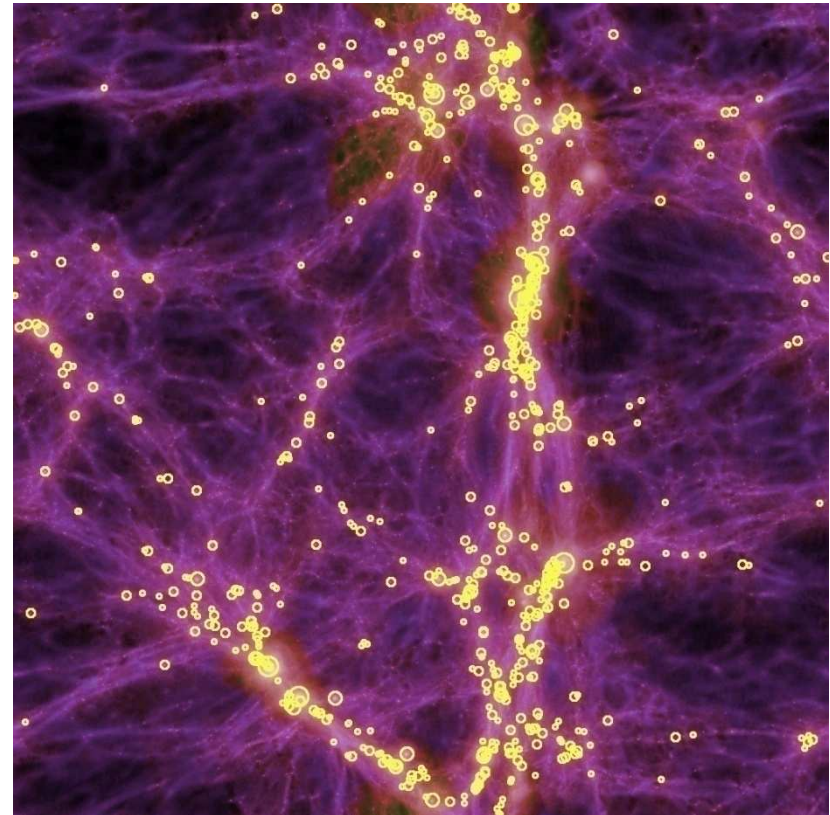
2. BSK: narodowy priorytet dla nauki i techniki jutra

- Symulacja to kluczowy element realizacji postępu w nauce i technice
- Pojęcie „symulacja” odnosi się do modeli obliczeniowych w analizie i predykcji procesów fizycznych lub biologicznych i zachowań systemów
- BSK ustanawiają nowy paradygmat, który będzie nieodzowny dla podjęcia wyzwań stojących na styku nauka - technika w początkach XXI wieku
- Symulacja stała się już nieodzowna w szerokich zastosowaniach związanych z analizą i syntezą (projektowaniem) techniczną
- Znaczenie i wielki potencjał symulacji został dawno zauważony przez wiodące ośrodki naukowe na świecie



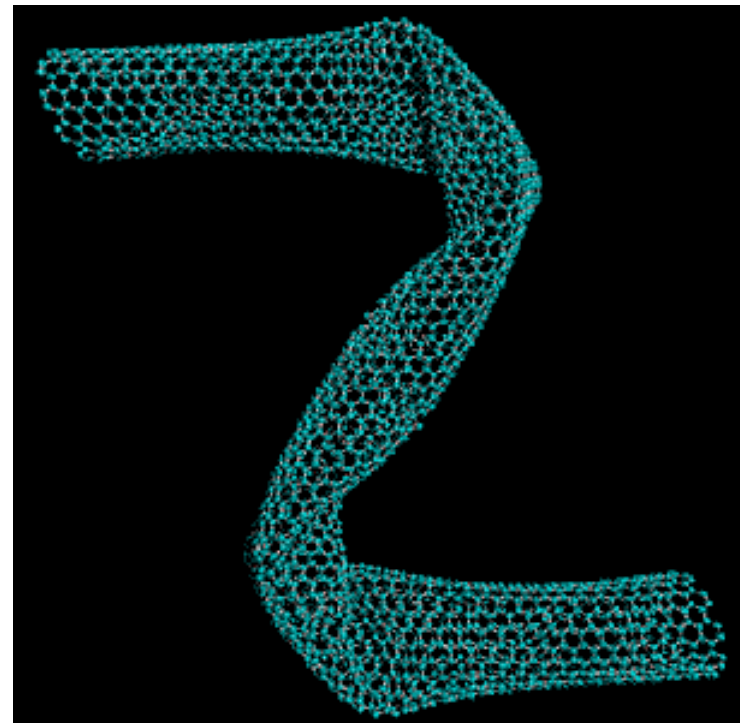
W jakich obszarach BSK mogą spowodować przełom?

- rozumienie i sterowanie zjawiskami zachodzącymi w wielu skalach (multiscale) oraz z uwzględnieniem wielu pól fizycznych i biofizycznych (multiphysics),
- fundamentalny rozwój w nanotechnologii, biomedycynie, inżynierii materiałowej, energetyce i inżynierii środowiska, naukach o ziemi i o życiu,
- znaczące poprawienie dokładności i użyteczności prognoz obliczeniowych (np. meteorologii i klimatologii),
- rozwój w wielu obszarach inżynierii z bezpośrednim przełożeniem na poprawę jakości życia, zdrowia, bezpieczeństwa, konkurencyjności i bogactwa Polski



Jak osiągnąć założone cele?

- zrewolucjonizować obecne wyobrażenie o symulacji komputerowej i jej stosowaniu, przez nauczenie się wykorzystywania nowych odkryć powstałych dzięki symulacjom wieloskalowym i wielopolowym,
- poczynić znaczące postępy w technologiach wspierających BSK, czyli w obliczeniach dużej skali, metodach analizy danych oraz algorytmach,
- przeprowadzić przegląd systemu edukacji, aby przystosować go do potrzeb BSK, w zakresie badań naukowych i nauczania
- zmienić sposób finansowania i prowadzenia badań naukowych w Polsce.



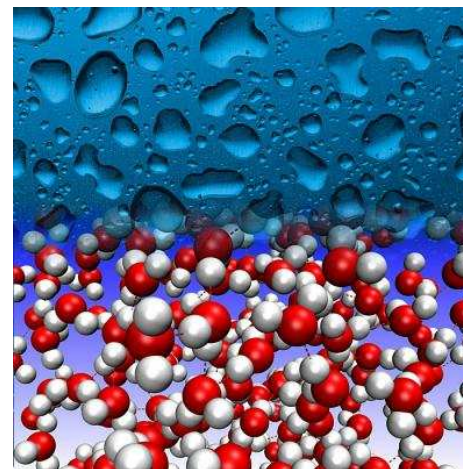
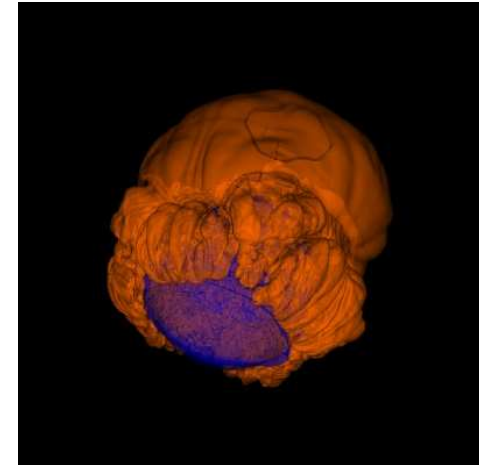


3. Efekty i korzyści ze stosowania BSK

- Medycyna i biologia,
- Nauki techniczne,
- Fizyka, astronomia, chemia,
- Meteorologia i klimatologia,
- Nauki społeczne i ekonomiczne,
- Energetyka i środowisko,
- Zastosowania przemysłowe i obronne,
- Bezpieczeństwo narodowe.

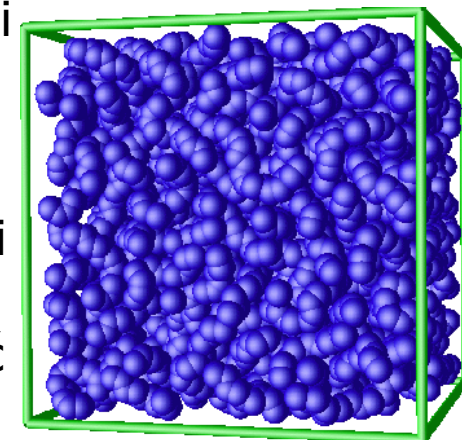
Zastosowania BSK – medycyna i biologia

- Zarówno praktyka medyczna jak i inżynieria to dyscypliny wymagające rozwiązywania problemów
- Program rozwoju BSK może prowadzić do rozwoju nowego ujęcia w praktyce medycznej, nazywanego roboczo **Medycyną Opartą na Symulacjach**
- Medycyna kliniczna
- Modelowanie wieloskalowe komórek
- Modelowanie w biotechnologii i farmakologii
- Modelowanie w onkologii
- Biologia obliczeniowa
- Bioinformatyka



Zastosowania BSK – nauki techniczne

- Dzięki BSK, rozwój w inżynierii materiałowej będzie umożliwiał integrację podstawowej, interdyscyplinarnej wiedzy z zastosowaniami technologicznymi,
- Istniejące problemy praktyczne wymagają optymalizacji funkcjonalnych własności materiałów przez sterowanie ich mikrostrukturą
- wyjątkowa rozległość – modelowanie materiałów i ich symulacja spaja różne obszary fizyki, mechaniki, chemii oraz inżynierii
- eliminacja empiryzmu – założenia empiryczne mogą być sukcesywnie zastępowane przez rzeczywisty ilościowy opis fizyczny; opis ilościowy pozwala na dokładne zbadanie i uzupełnienie każdej części modelu i symulacji w kontrolowany sposób
- wizualizacja zjawisk



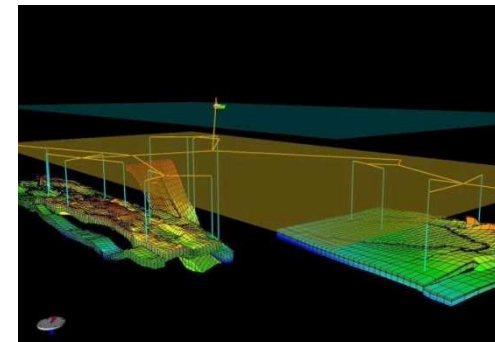
Zastosowania BSK – przemysł

- Aby poprawić konkurencyjność wymagane są krótkie cykle projektowania, które są kluczowe dla utrzymania wysokiego tempa rozwoju nowych produktów
- Jeśli przemysł zastępuje testowanie symulacją, to narzędzia symulacji muszą podlegać procedurom surowej weryfikacji i walidacji, aby sprawdzić i poprawić ich skuteczność
- BSK mają potencjał, aby dawać, w krótkich cyklach projektowania, takie rezultaty, które są zoptymalizowane pod względem kosztów wytwarzania i całkowitego wpływu na środowisko



Zastosowania BSK – przemysł. Ograniczenia

- analiza modeli wymaga dużo czasu, w szczególności dla geometrii złożonych systemów inżynierskich (statki, samochody i samoloty); wyznaczenie własności materiałowych wymaga obszernych testów w małej skali, zanim symulacja może być rozpoczęta; testowanie wydłuża czas otrzymania wyników symulacji i stąd wydłużeniu ulega również cykl projektowania
- wymaga się metod umożliwiających łączenie modeli w różnych skalach i symulowanie złożonych sprzężonych zjawisk fizycznych; takie modele i metody symulacji są w trakcie tworzenia
- symulacja jest zwykle separowana od procesu optymalizowania podczas projektowania i nie może równocześnie uwzględniać takich czynników jak technologiczność, koszt i wpływ na środowisko



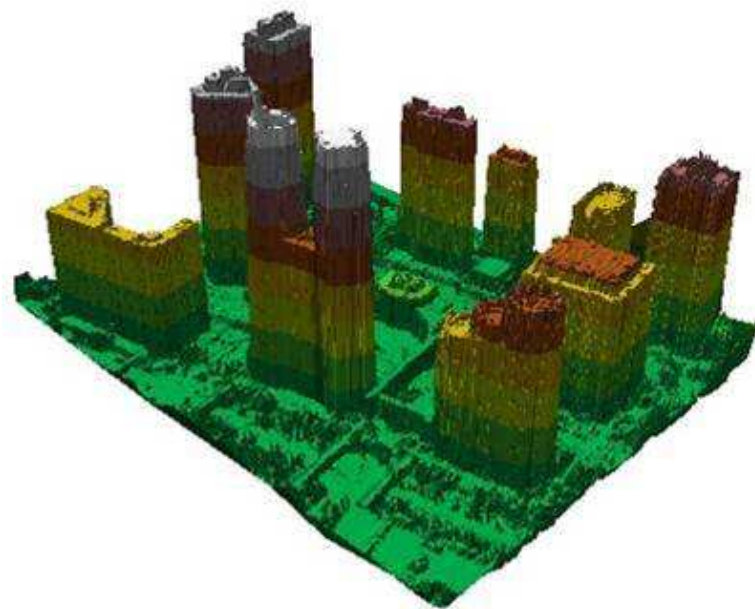


Zastosowania BSK – przemysł. Wyzwania

- Metody wieloskalowe i wielopolowe, które obejmują szeroki zakres skal przestrzennych i czasowych oraz łączą różne typy zjawisk fizycznych i biologicznych
- Metody obliczeń zjawisk makroskopowych, biorących pod uwagę własności materiałów i proces wytwarzania, z uwzględnieniem zachowań w skalach niższych
- Efektywne metody optymalizacji, które uwzględniają złożoność systemów zintegrowanych, biorą pod uwagę niepewności i prowadzą do krzepkich metod projektowania
- Podstawy dla walidacji, weryfikacji i zarządzania wiedzą niepewną
- Metody szybkiego generowania modeli o złożonych geometriach i własnościach materiałowych

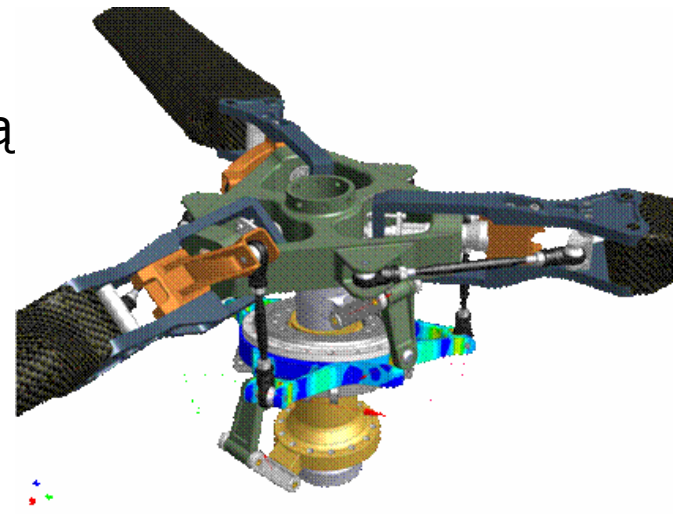
Zastosowania BSK – bezpieczeństwo

- BSK mogą pozwolić na predykcję konsekwencji zagrożeń oraz odpowiedzi im przeciwdziałającym
- „Cyfrowe miasta” – modelowanie wieloskalowe
- „Cyfrowe ekosystemy”
- ochrona przed zanieczyszczeniami
- optymalizacja infrastruktury
- prognozowanie długookresowego wpływu na środowisko
- optymalizacja odpowiedzi na zagrożenia
- optymalizacja infrastruktury bezpieczeństwa środowiska miejskiego



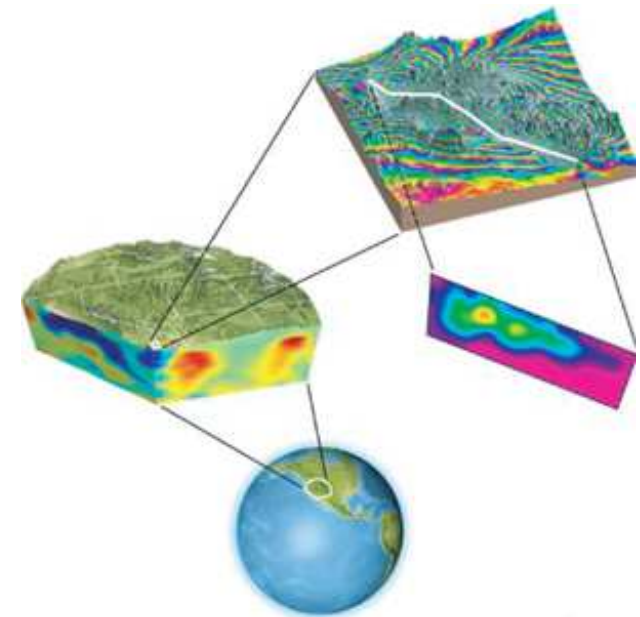
4. Wyzwania, bariery i możliwości w BSK

- 4.1. Tyrania skal: wyzwania modelowania i symulacji wieloskalowej
- 4.2. Weryfikacja, walidacja i zarządzanie wiedzą niepewną
- 4.3. Nowe perspektywy w oprogramowaniu symulacyjnym
- 4.4. Symulacje oparte na dużych zbiorach danych, rola wizualizacji w BSK
- 4.5. Algorytmy nowej generacji i możliwości obliczeniowe (np. algorytmy inspirowane biologicznie)



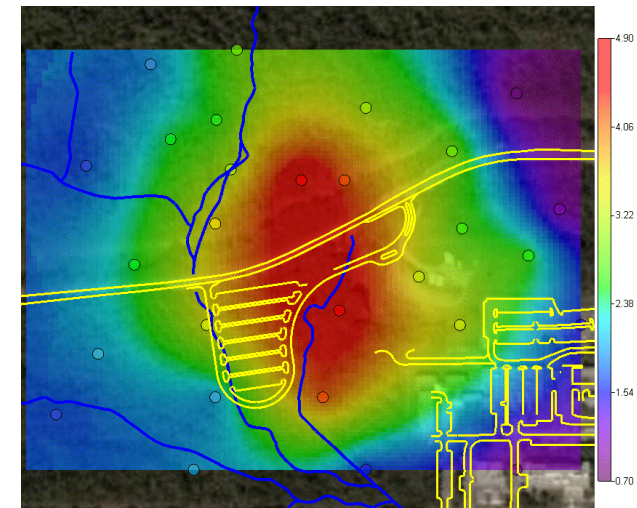
4.1 Tyrania skal: wyzwania modelowania i symulacji wieloskalowej

- Rozwój efektywnych metod modelowania wieloskalowego wymaga istotnego przełomu w matematyce obliczeniowej i nowego myślenia w modelowaniu zdarzeń naturalnych, zachodzących w wielu skalach
- Potężne przeszkody pozostają w łączeniu znacznie różniących się skal czasowych i przestrzennych oraz w łączeniu różnych dyscyplin powstałych podczas badań nad metodami symulacji. Te wnioski są wspólne dla wszystkich zastosowań BSK. Do przezwyciężenia tych trudności potrzebny jest dalszy rozwój badań podstawowych.



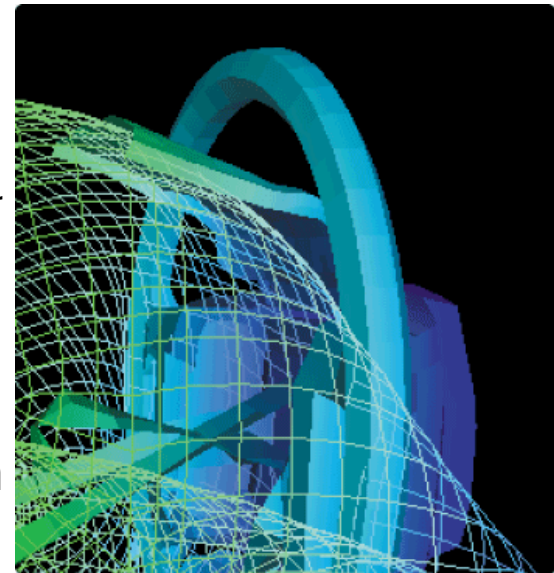
4.2. Weryfikacja, walidacja i zarządzanie wiedzą niepewną

- Jaki poziom pewności można przypisać przewidywanym результатам, w świetle tego co wiemy o systemie fizycznym lub biologicznym i modelu używanym do jego opisu?
- Najbardziej skomplikowanym aspektem walidacji i weryfikacji jest uwzględnienie niepewności w danych charakteryzujących modele matematyczne zjawisk natury, zjawisk społecznych i ekonomicznych
- Korzystanie z modeli stochastycznych lub rozmytych może prowadzić do gigantycznego wzrostu wymagań związanych ze złożonością, objętością, zasobami, operacjami i algorytmami wyszukiwania danych
- Potrzebne są nowe metody dla stosowania modeli z niepewnościami (granular computing) oraz dla rozwoju innych skutecznych metod zarządzania wiedzą niepewną.



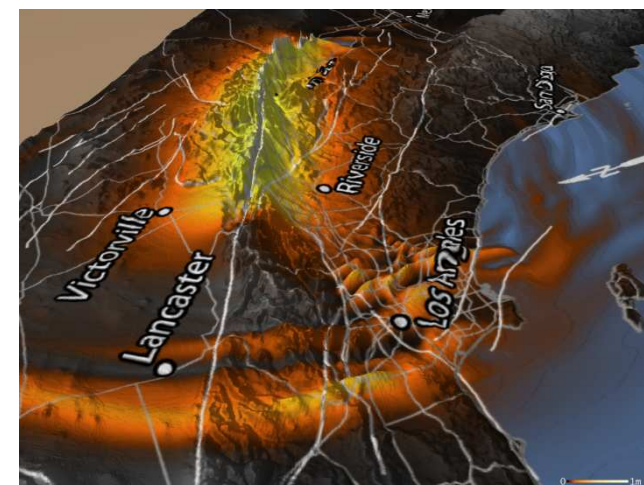
4.3. Nowe perspektywy w oprogramowaniu symulacyjnym

- Potrzebna jest zupełnie nowa metodologia aby rozwijać oprogramowanie, które będzie zawierać modele i metody używane nowych BSK
- Twórcy oprogramowania przyszłości nie tylko będą musieli radzić sobie z bardzo złożonymi algorytmami, ale również będą musieli rozumieć ważne szczegóły zastosowań tych algorytmów
- Większość z używanego obecnie oprogramowania jest nieodpowiednia dla wieloaspektowych wyzwań BSK. Nowe narzędzia programistyczne, paradygmaty i protokoły będą musiały być rozwijane, tak by oprogramowanie mogło być przenoszone między różnymi polami badań bez zbędnego duplikowania



4.4. Symulacje oparte na dużych zbiorach danych, rola wizualizacji w BSK

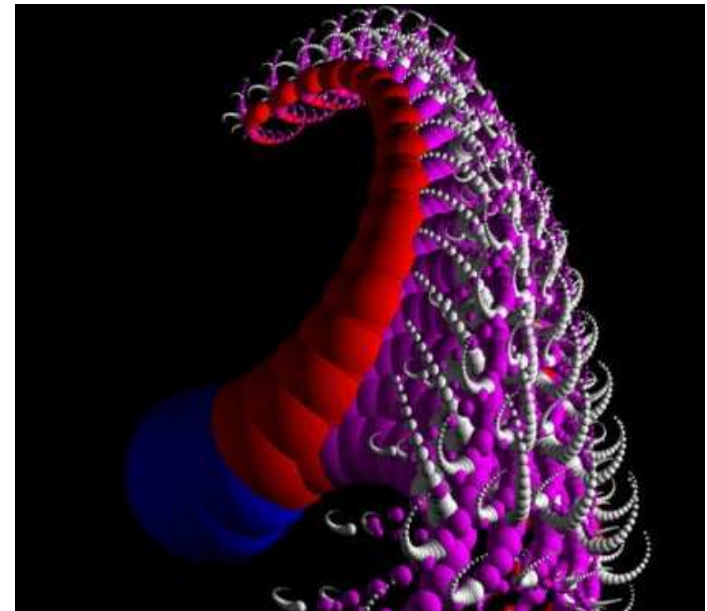
- Era w której obliczenia z wykorzystaniem dużej ilości danych oraz obliczenia naukowe dużej skali stanowiły odrębne obszary się skończyła
- Wizualizacja jest pojęciem fundamentalnym dla naszej zdolności interpretowania modeli złożonych zjawisk
- Istnieje potrzeba tworzenia podstaw dla wizualizacji w BSK z uwzględnieniem niepewności i możliwości badania nowych reprezentacji wizualnych błędów symulacji
- Wizualizacja i zarządzanie danymi to kluczowe technologie dla umożliwienia rozwoju BSK





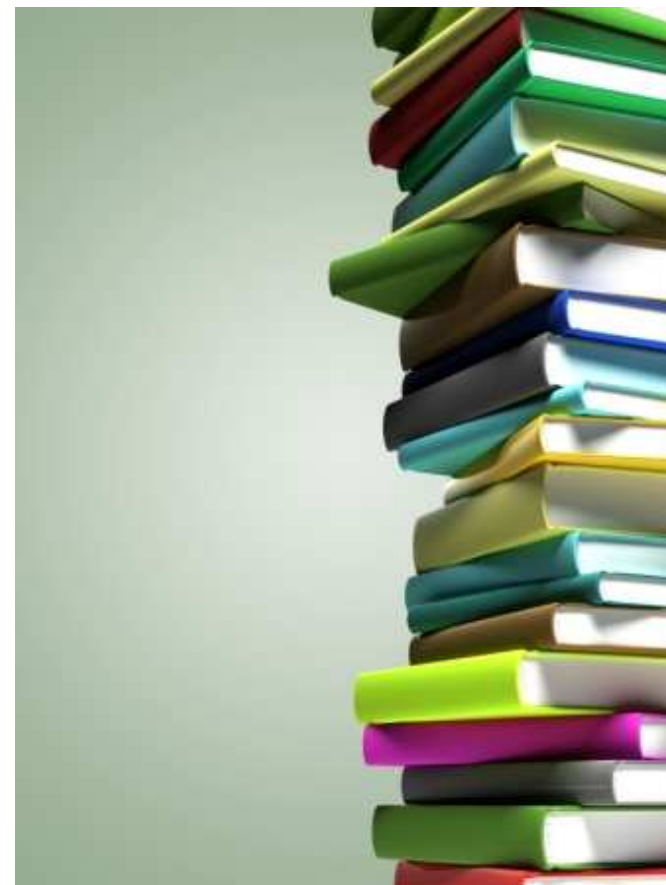
4.5. Algorytmy nowej generacji i możliwości obliczeniowe

- Inwestycje w badania naukowe w zakresie dyscyplin podstawowych związanych z BSK powinny być zbalansowane z inwestycjami w zakresie rozwoju algorytmów i procedur obliczeniowych dla zastosowań w zakresie dynamicznych modeli wieloskalowych i wielopolowych



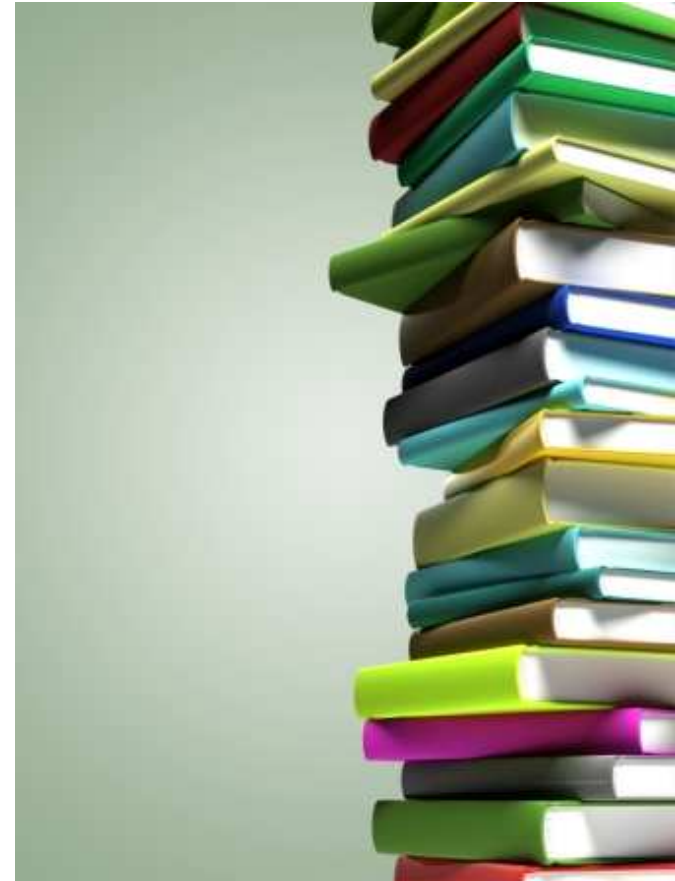
5. Edukacja i kształcenie młodych kadr w zakresie BSK (1)

- Należy otworzyć nowe możliwości dla multidyscyplinarnych badań naukowych nowej generacji
- Znaczące postępy w BSK wymagają dramatycznych zmian w edukacji z zakresu nauk ścisłych i technicznych. Muszą zostać wprowadzone interdyscyplinarne programy nauczania w zakresie nauk obliczeniowych, a tradycyjne granice między dyscyplinami w szkolnictwie wyższym muszą stać się przepuszczalne dla wymiany informacji między specjalistami z różnych dziedzin, pracującymi wewnątrz interdyscyplinarnych zespołów naukowych



5. Edukacja i kształcenie kadr naukowych w zakresie BSK (2)

- Promowanie kadry naukowej na poziomie studiów doktoranckich i habilitacji w zakresie BSK
- W jakiej dyscyplinie naukowej?
 1. Informatyka?
 2. Utworzenie 'szerszej' dyscypliny: nauki obliczeniowe i informacyjne?
 3. Nowa dyscyplina o wyraźnym charakterze obliczeniowym: inżynieria obliczeniowa?





6. Wnioski (1)

- Modelowanie i symulacja komputerowa będą pozwalały na badanie zjawisk naturalnych, systemów technicznych, biologicznych i społecznych, stanowiących wyzwanie dla analizy, pomiarów i metodologii eksperymentalnej. W efekcie, założenia empiryczne zostaną zastąpione modelami obliczeniowymi o podstawach naukowych
- Modelowanie i symulacje będą miały zastosowanie w różnych obszarach, które decydują o poziomie cywilizacyjnym – od mikroprocesorów do infrastruktury miast. Nowe metody symulacji będą stanowiły podstawę dla technologii, które są obecnie rozważane jedynie potencjalnie
- Modelowanie i symulacje będą pozwalały na projektowanie i wytwarzanie materiałów i produktów na naukowej podstawie, z mniejszym zastosowaniem metody prób i błędów i krótszymi cyklami projektowania.



Wnioski (2)

- Modelowanie i symulacje poprawią bardziej zdolność do przewidywania rezultatów i optymalizacji rozwiązań przed gromadzeniem rzeczywistych danych do procesu projektowania i podejmowania decyzji
- Modelowanie i symulacje rozwiną zdolność do radzenia sobie z problemami, które są zbyt złożone dla tradycyjnych metod
- Modelowanie i symulacje wprowadzą narzędzia i metody, które będą mogły mieć zastosowanie w inżynierii biomedycznej i we wszystkich dyscyplinach inżynierskich



7. Główne zalecenia raportu

- Istnieje pilna potrzeba zmian w strukturach organizacyjnych w agencjach rządowych finansujących badania naukowe w Polsce (NCBR, NCN) aby ułatwić i zapewnić proces długookresowego finansowania badań związanych z BSK.
- Fundusze na badania z zakresu dyscyplin odnoszących się do BSK powinny wyraźnie wzrosnąć.
- Powinny powstać długookresowe programy badań naukowych wysokiego ryzyka, aby osiągnąć korzyści płynące z rozwoju BSK.
- Zainicjowanie zmian w systemie szkolnictwa wyższego, zwłaszcza II stopnia (studia magisterskie) oraz na poziomie III (studia doktoranckie), aby zwrócić uwagę na multidyscyplinarną naturę współczesnej nauki i techniki. Rozważyć powołanie nowej dyscypliny naukowej z zakresu BSK.
- Zaleca się powołanie polskiego czasopisma naukowego o silnej pozycji międzynarodowej z zakresu BSK



NCBR - Narodowe Centrum Badań i Rozwoju

- Cel raportu: przygotowanie programu strategicznego nt.:

Badań bazujących na Symulacji Komputerowej



MNiSW – Dyscypliny obliczeniowe

- N119 - Inne w obszarze Nauk Humanistycznych i Społecznych oraz Badania Interdyscyplinarne (zlikwidowana)
- N522- Inne w obszarze Nauk Technicznych oraz Badania Interdyscyplinarne (zlikwidowana)
- N519 – Metody Komputerowe w Nauce
- N516- Technologie Informacyjne

**Przyszła struktura
Narodowego Centrum Nauki (NCN)
ma być wzorowana na**

European Research Council (ERC)

W ERC wszystkie dyscypliny naukowe
podzielone na 3 grupy:

**Physical Sciences and Engineering
(10 Panels: PE1-PE10)**

**Life Sciences
(9 Panels: LS1-LS9)**

**Social Sciences and Humanities
(6 Panels: SH1-SH6)**



ERC – Dyscypliny obliczeniowe

- PE1_16 – numerical analysis and scientific computing,
- PE6_9 – scientific computing,
- PE8_4 – computational engineering,
- PE7_4 - simulation engineering and modelling,
- LS2_9 – bioinformatics,
- LS2_10 – computational biology.



Raport
amerykański
dla NSF, 2006



Simulation - Based Engineering Science

*Revolutionizing Engineering Science
through Simulation*

February 2006

*Report of the National Science Foundation
Blue Ribbon Panel on
Simulation-Based Engineering Science*



Raport amerykański 2009



WTEC Panel Report on

INTERNATIONAL ASSESSMENT OF RESEARCH AND DEVELOPMENT IN SIMULATION-BASED ENGINEERING AND SCIENCE

Sharon C. Glotzer (Chair)
Sangtae Kim (Vice Chair)
Peter T. Cummings
Abhijit Deshmukh
Martin Head-Gordon
George Karniadakis
Linda Petzold
Celeste Sagui
Masanobu Shinozuka



World Technology Evaluation Center, Inc.
4800 Roland Avenue
Baltimore, Maryland 21210





ECCOMAS Raport

Simulation-Based Engineering Sciences
dla FP-8 i ERC (w przygotowaniu)