

Программа и тезисы докладов

Международной конференции «Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования», посвященной 90-летию со дня рождения академика Г.И. Марчука Институт вычислительной математики РАН, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, 9-ый этаж

8 июня 2015 г.

14:00 – 15:00. Регистрация участников.

14:30 – 15:00. Кофе.

15:00 – 16:00. Открытие конференции.

Выступления Е.Е. Тыртышников, Ю.С. Осипова, В.В. Козлова, В.А. Садовниченко, А.В. Фролова.

Заседание 1. Председатель: Е.Е. Тыртышников.

16:00 – 16:30. В.И. Агошков, В.Б. Залесный, В.П. Шутяев. О работах Г.И. Марчука в области вычислительной математики и ее приложений.

16:30 – 17:00. В.П. Дымников. О работах Г.И. Марчука в области физики атмосферы и океана.

17:00 – 17:30. Г.А. Бочаров. О работах Г.И. Марчука в области математической иммунологии.

17:30 – 19:00. Краткие выступления с воспоминаниями о Г.И. Марчуке.

19:00 – 21:00. Фуршет.

9 июня 2015 г.

Заседание 2. Председатель: В.И. Агошков.

10:00 – 10:30. J. Tribbia (National Center for Atmospheric Research, Boulder, USA). G.I. Marchuk and atmospheric predictability: an adjoint perspective.

Historically, both two-dimensional and quasi-geostrophic turbulence have served as paradigms for the behavior of the atmosphere on the large scale. Both barotropic (2D) and baroclinic (quasi-3D) systems have been used to understand the nature of the atmospheric energy spectrum and the flow of information and uncertainty through scale interactions. Through the the analysis of the flow of uncertainty, estimates of atmospheric predictability have been obtained using the inverse cascade of uncertainty inherent in the dual inviscid constraints of conservation of energy and (potential) enstrophy common to both 2D and Q-G flows. Despite their similarity with respect to inviscid constraints, the details of the growth of uncertainty and the loss of predictability due to small scale errors is considerably different in 2D and Q-G turbulence. This talk will discuss and analyze the nature of these differences and compare their error growth behavior to the error growth in a more realistic model of the atmosphere, the NCAR Community Atmosphere Model (CAM). The analysis will use the adjoint methodology that was introduced into the field of

atmospheric dynamics by G.I. Marchuk. In particular, the cascade of error energy from unresolved scales through resolved scales will be undertaken using structures obtained through non-modal linear stability analysis techniques giving a different perspective to the inverse energy cascade.

10:30 – 11:00. В.В. Пененко (Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск). Концепция природоохранного прогнозирования и вариационные методы для её реализации.

В развитие идей Г.И. Марчука для решения задач охраны окружающей среды, сформулирована концепция природоохранного прогнозирования. В её основу положен вариационный подход, в котором с единых позиций рассматриваются прямые, сопряженные и обратные задачи этого направления. Неотъемлемой частью концепции является методология совместного использования математических моделей и доступных данных наблюдений о поведении реальных процессов. В докладе будет дан краткий исторический обзор и представлено современное состояние и перспективы исследований, использующих вариационные технологии для построения согласованных численных моделей разномасштабных процессов атмосферной динамики и химии.

11:00 – 11:30. F.-X. Le Dimet (Université Grenoble-Alpes, France), V. Shutyaev (Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia), T.H. Tran (Institute of Mechanics, VAST, Ha Noi, Vietnam). Sensitivity and error propagation in a variational framework.

At the present time variational methods, based on Optimal Control Theory, are the most frequently used in meteorological operational centers. All sources of information: models, observations, statistics are linked together in the optimality system (O.S.): the Euler-Lagrange equation of the optimization problem. Basically a sensitivity analysis is the evaluation of the gradient of some response function with respect to some input of the problem. Therefore in a variational context the sensitivity has to be evaluated from the derivation of the O.S., leading to second order analysis. We will demonstrate that the sensitivity is the solution of a non-standard problem: a system of two equations one of them having both an initial and final condition and the other equation doesn't bear any condition. In this talk we will apply this study to a pollution problem in a fluid. The problem is governed by the general equation of fluid dynamics and an equation of concentration. We will consider the sensitivity of the retrieved field of pollution with respect to the observations: the non-standard is exhibited and we will show some numerical results. The goal of this application being the evaluation of the optimal location of new sensors.

11:30 – 12:00. Перерыв на кофе.

12:00 – 12:30. Е.Е. Тыртышников (Институт вычислительной математики РАН, Москва). Матрицы малого ранга в математике и приложениях.

В докладе будет рассказано о новых направлениях вычислительной линейной алгебры, которые получили развитие в ИВМ РАН за последние 20 лет. Ключевая роль в них принадлежит матрицам малого ранга, которые используются как для представления данных, в том числе многомерных матриц, так и для построения эффективных вычислительных алгоритмов. Новые области применений связаны с задачами оптимизации, в частности для докинга при разработке лекарственных препаратов и для идентификации параметров в моделях математической иммунологии. Получены также новые эффективные методы для специальных классов нестационарных задач, в частности для так называемого основного кинетического уравнения, и новые подходы к численному решению уравнений типа Смолуховского.

12:30 – 13:00. Yu. Kuznetsov (University of Houston, USA). Non-conforming discretizations for diffusion equations.

13:00 – 13:30. V. Lucarini (University of Hamburg, Germany). Response theory in geophysical fluid dynamics: parametrizations and climate change prediction.

The climate is a complex, chaotic, non-equilibrium system featuring a limited horizon of predictability, variability on a vast range of temporal and spatial scales, instabilities resulting into energy transformations, and mixing and dissipative processes resulting into entropy production. Despite great progresses, we still do not have a complete theory of climate dynamics able to encompass instabilities, equilibration processes, and response to changing parameters of the system. We will outline some possible applications of the response theory developed by Ruelle for non-equilibrium statistical mechanical systems, showing how it allows for setting on firm ground and on a coherent framework concepts like climate sensitivity, climate response, and climate tipping points. We will show results for simple yet instructive models such as that presented by Lorenz in 1996, and for comprehensive global circulation models. The results are promising in terms of suggesting new ways for approaching the problem of climate change prediction and for using more efficiently the enormous amounts of data produced by modeling groups around the world. We will then show how response theory can be used for constructing parametrizations for multiscale systems, providing explicit formulas for the effective dynamics identical to what can be obtained using a perturbative Mori-Zwanzig approach. This might be relevant for constructing practical parametrizations for weather and climate models.

References

V. Lucarini, S. Sarno, A Statistical Mechanical Approach for the Computation of the Climatic Response to General Forcings. *Nonlin. Processes Geophys.*, 18, 7-28 (2011)

J. Wouters, V. Lucarini, Multi-level dynamical systems: Connecting the Ruelle response theory and the Mori-Zwanzig approach. *J. Stat. Phys.* 151, 850-860 (2013)

V. Lucarini, R. Blender, C. Herbert, F. Ragone, S. Pascale, J. Wouters, *Mathematical and Physical Ideas for Climate Science*, *Reviews of Geophysics* doi: 10.1002/2013RG000446 (2014)

F. Ragone, V. Lucarini, F. Lunkeit, A new framework for climate sensitivity and prediction, arXiv:1403.4908 (2014)

13:30 – 15:00. Перерыв на обед.

Заседание 3. Председатель: В.Б. Залесный.

15:00 – 15:30. O. Pironneau (LJLL-UPMC, Sorbonne Université, Paris, France). Fluid-structure interaction algorithms with application to blood flows.

Fluid-Structure Interactions and Fluid-Fluid Interactions are numerically difficult because the geometry changes with time and because they require the coupling of variables of different physical origin such as velocities for the fluid part and derivative of displacements for the structural part. At least two classes of problems have been investigated numerically extensively: blood flows [1] and free motions of objects in flows, whether self-propelled or passive and rigid or deformable [2]. A number of algorithms have been proposed, each with different coupling mechanisms. We shall review some of them and recall the mathematical results known for immersed boundaries [3], artificial density, fluid as solid, both with Finite Elements [4] or SPH [5], Eulerian/Lagrangian formulations [6], etc. Algorithms that iterate between the structure and the fluid have usually restricted stability because of the “added mass effect”; we shall present a method that solves the fluid and solid variables in the same variational formulation by using a

semi-linearization called “transpiration condition” [7]. The method is unconditionally stable for pipe flows. It will be illustrated with numerical results for blood flow and comparison with others methods [8].

References

1. L. Formaggia, A. Quarteroni, and A. Veneziani. Cardiovasuclar Mathematics. Springer MS&A Series. Springer-Verlag, 2009.
2. J. Lighthill, Mathematical Biofluid dynamics, SIAM publication, Philadelphia, 1985.
3. C. Peskin, The immersed boundary method. Acta Numerica, 11:479-517, 2002.
4. M. Bergman, A. Iollo, Journal of Computational Physics 230 (2011) 329–348.
5. J. H.M. Ever, I.A. Zisis, B. J. van der Linden, Manh Hong Duong. From continuum mechanics to SPH particle systems and back: Systematic derivation and convergence, ArXiv :1501.04512v1.
6. P. Le Tallec and J. Mouro. Fluid structure interaction with large structural displacements. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg 190, 3039-3067. 2001.
7. T. Chacon, V. Girault, F. Murat, O. Pironneau, Analysis of a Simplified Coupled Fluid-Structure Model for Computational Hemodynamics, (submitted to SIAM-SINUM, 2014).
8. M. Bukaca, S. Canic, R. Glowinski, J. Tambacac, A. Quainia. FSI in blood flow capturing non-zero longitudinal structure displacement. J. Comp. Physics 235 (2013) 515–541.

15:30 – 16:00. Б.Н. Четверушкин (Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва). Кинетические схемы для решения задач магнитной газовой динамики.

16:00 – 16:30. В.В. Шайдуров, Г.И. Щепановская, М.В. Якубович (Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск). Полулагранжева аппроксимация в нестационарных уравнениях Навье-Стокса.

Сначала в качестве простой иллюстрации будет рассмотрено применение полулагранжевой аппроксимации для решения параболического уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f.$$

В упрощенной формулировке эта аппроксимация состоит в восприятии суммы первых производных в качестве производной по направлению \vec{l}

$$\frac{\partial u}{\partial \vec{l}} = \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x}$$

и ее последующей аппроксимации в заданном направлении между временными слоями. При таком подходе на каждом временном слое получается краевая задача с самосопряженным оператором, которую удобно решать методом конечных элементов или конечных разностей. Здесь же будет проиллюстрировано повышение порядка точности этой аппроксимации на основе алгоритма коррекции разностями высоких порядков. Во второй части будет рассмотрено применение полулагранжевой аппроксимации для решения двумерной нестационарной системы Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа. Будет продемонстрирована модификация такой аппроксимации, сохраняющая среднеквадратичную норму решения по пространству и обеспечивающая вычислительную устойчивость процесса численного решения с помощью метода конечных элементов. Теоретические конструкции будут проиллюстрированы на примере решения задачи обтекания двумерного тела в сверхзвуковом потоке газа.

16:30 – 17:00. Перерыв на кофе.

17:00 – 17:30. G. Branstator (National Center for Atmospheric Research, Boulder, USA). Uncertainty in decadal predictions resulting from imperfect knowledge of the initial conditions.

Efforts are now underway to undertake prediction of the state of the climate system in the coming decades in the same way that the prediction of weather is undertaken, namely as an initial value problem. But just as is true for the system that controls weather, the climate system is chaotic, which sets a limit on the duration for which taking into account estimates of the initial state can have a positive impact on predictions of climate. Here we measure that limit for conditions in the upper layers of the ocean and for the Atlantic Meridional Overturning Circulation based on the behavior of coupled climate models, including models that participated in CMIP5. We find that overall the potential for gaining forecast skill through initialization of forecasts with very good estimates of the current state of the climate system lasts about 5 or 10 years. But this so-called predictability limit is actually highly variable and depends on many factors. Through employment of methods that enable assessment of predictability from long general circulation model control runs, rather than the Monte Carlo method that is usually employed, we are able to estimate the sensitivity of predictability to various factors. We find that the predictability limit depends on a) the structure of the initial state, b) the geographical region one is examining, c) the variable being analyzed, d) the state component studied, e) the degree to which time averaged fields are considered, and f) the model whose behavior is investigated. By focusing on special regions, variables, modes, initial conditions and time averaged quantities the limit of predictability can be extended considerably from the average limit.

17:30 – 18:00. R. Bates (Meteorology and Climate Centre School of Mathematical Sciences University College Dublin, Dublin, Ireland). A defence of some low observational estimates of effective climate sensitivity to doubled CO₂.

Lindzen and Choi (2011) have used satellite measurements of the Earth's radiative response to surface temperature perturbations over the oceanic portion of the tropics to calculate a well-defined radiative response coefficient for this zone. This coefficient was used in a two-zone (tropical-extratropical) energy balance model, with the extratropical radiative response coefficient assumed on physical grounds to equal the Planck blackbody value, to calculate an effective sensitivity of the climate system to a CO₂ doubling. The value of the sensitivity thus obtained was less than 1°C. This value lies below the [1.5, 4.5] °C range of climate sensitivity given by IPCC (2013). The two-zone energy balance model used by Lindzen and Choi (2011) has been criticised for not including dynamical heat transport from the tropics to the extratropics. This defect has been remedied by the present author, using Model B of Bates (2012). It has been found that the addition of an explicitly parameterized dynamical heat transport to the two-zone energy balance model of Lindzen and Choi (2011) corroborates their conclusion regarding a low value of effective climate sensitivity. Some authors have obtained observational estimates of effective climate sensitivity using a global-average radiative response coefficient in conjunction with a zero-dimensional energy balance model. Such estimates have been presented as supporting the IPCC sensitivity range. Close examination, however, shows that they do not actually do so. It will be argued that the low effective climate sensitivity estimates obtained using satellite observations and two-zone energy balance models remain a case to be answered.

References

1. Bates, J. R., 2012. Climate stability and sensitivity in some simple conceptual models. *Clim. Dyn.*, **38**, 455-473. doi 10.1007/s00382-010-0966-0.

2. Lindzen, R.S. and Choi, Y.-S., 2011. On the observational determination of climate sensitivity and its implications. *Asia-Pacific J. Atmos. Sci.*, **47**, 377-390.

18:00 – 18:30. В.П. Ильин (Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск). О фундаментальных проблемах математического моделирования.

Наступившая эра постпетафлопсных компьютеров и грядущий приход экзафлопсных вычислительных машин с сотнями миллионов процессоров и ядер, а также прорывные технологии и реиндустриализация экономики, требующие решения сверхбольших междисциплинарных, прямых и обратных, задач с реальными данными, ставят перед моделированием актуальные проблемы, которые, однако, в определенном виде формулировались Г.И. Марчуком около 40 лет назад. Сюда относятся, например, задачи автоматизации построения алгоритмов и их отображения на архитектуру ЭВМ, а также концепция создания вычислительных центров коллективного пользования. Сейчас эти подходы рассматриваются в плане масштабируемого распараллеливания, технологий сетевых и облачных вычислений, наукоемкого программирования с широким внедрением искусственного интеллекта, а также разработки интегрированного инструментального математического окружения, обеспечивающего эффективную поддержку всех основных этапов крупномасштабного вычислительного эксперимента, включая геометрическое и функциональное моделирование, генерацию сеток и аппроксимацию исходных задач, решение задач вычислительной алгебры и оптимизационные принципы решения обратных задач, средства принятия решений по результатам расчетов. В настоящем докладе данные вопросы исследуются на основе анализа имеющихся зарубежных и отечественных работ.

10 июня 2015 г.

Заседание 4. Председатель: В.Н. Лыкосов.

10:00 – 10:30. M. Wallace (University of Washington, Seattle, USA). TBD.

10:30 – 11:00. А.А. Романюха (Институт вычислительной математики РАН, Москва). Фундаментальные физиологические механизмы в моделях инфекционных заболеваний.

Разработанные Марчуком индексы тяжести заболеваний позволяют решать задачу количественной оценки нарушений гомеостаза внутренней среды или/и функционального резерва органа мишени. Особенностью предложенных Г.И. Марчуком моделей инфекционных заболеваний является описание динамики не только иммунного ответа и патогена, но и повреждения органа мишени. В результате такие модели позволяют описать фундаментальные физиологические трейд-оффы между затратами организма на иммунную и физиологическую защиту и его потерями из-за действия патогена. Это позволяет обосновать условие оптимальности иммунной защиты, как минимума суммы затрат организма на защиту и потерь вызванных болезнью.

11:00 – 11:30. V.I.V. Voevodin (M.V. Lomonosov Moscow State University, Russia). AlgoWiki: an open encyclopedia of parallel algorithmic features.

Computers evolve quickly, and there have been at least six generations of computing architecture over the last forty years that caused the need for radical changes in software. Vector computers, vector-parallel, massive parallel computers, shared-memory nodes, clusters of shared-memory computers, computers with accelerators... The computing community has survived this, but in

each evolution, the software basically had to be rewritten from scratch as each new generation of machines required singling out new properties in the algorithms, and that was reflected in the software.

Alas, there is no reason to hope that the situation will change for the better in the future. Vendors are already considering various prospective architectures, featuring light and/or heavy computing cores, accelerators of various types, SIMD and data-flow processing concepts. In this situation, codes will yet again have to be rewritten in order to utilize the full potential of future computers. It's an endless process that, understandably, doesn't make software developers any happier. However, the situation isn't quite hopeless. Algorithms themselves don't change; only the requirements that new computers present to the structure of algorithms and programs change. The idea of a deep a priori analysis of properties of algorithms and their implementation formed the basis for the AlgoWiki project. The main purpose of the project is to present a description of the fundamental properties of various algorithms giving a complete understanding of both their theoretical potential and the particular aspects of their implementation for various classes of parallel computing systems.

The description of all algorithms in AlgoWiki consists of two parts. The first part describes algorithms and their properties. The second part is dedicated to describing particular aspects of their implementation on various computing platforms. This division is made intentionally, to highlight the machine-independent properties of algorithms which determine their potential and the quality of their implementations on parallel computing systems, and to describe them separately from a number of issues related to the subsequent stages of programming and executing the resulting programs. In addition to the classical algorithm properties such as serial complexity, AlgoWiki also presents additional information, which together provides a complete description of the algorithm: its parallel complexity, parallel structure, determinacy, data locality, performance and scalability estimates, communication profiles for specific implementations, and many others.

The outcome of the AlgoWiki project is an open encyclopedia of algorithm properties and the particular aspects of their computer implementation. The pilot version of the encyclopedia is available at <http://algowiki-project.org>.

11:30 – 12:00. Перерыв на кофе.

12:00 – 12:30. G.M. Kobelkov (M.V. Lomonosov Moscow State University, Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia). On modifications of the Navier-Stokes equations.

We consider a modification of the Navier-Stokes equations arising in ocean dynamics. Namely, we consider the problem

$$\begin{aligned}
 u_t - \nu \Delta u - \nu \partial_z^2 u - \nu \varepsilon \operatorname{div} (D(u) \nabla u) + \nabla p + (u \cdot \nabla) u + w \partial_z u &= f, \\
 w_t - \nu \Delta w - \nu \partial_z^2 w + \partial_z p + (u \cdot \nabla) w + w \partial_z w &= g, \\
 \operatorname{div} u + \partial_z w &= 0, \\
 (u, w)(x, 0) = (u_0, w_0)(x, 0), \quad \operatorname{div} u_0 + \partial_z w_0 = 0, \quad (u, w) \Big|_{\partial \Omega \times [0, T]} &= 0,
 \end{aligned} \tag{1}$$

where

$$\operatorname{div} u = \partial_{x_1} u_1 + \partial_{x_2} u_2, \quad \nabla p = (\partial_{x_1} p, \partial_{x_2} p), \quad D(u) = |\nabla u|^2.$$

The following theorem is valid.

Theorem. *For any $\nu, \varepsilon > 0$, any sufficiently smooth right-hand sides f and g , arbitrary initial data (u_0, w_0) and any time interval $[0, T]$ there exists a solution to (1) “in the large”.*

12:30 – 13:00. Yu. Vassilevski (Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia). Patient-specific models in human physiology.

We present a state-of-the-art approach to the design of patient-specific models on the basis of MRI or CT data. At the preprocessing stage the segmentation of the medical image is applied. We discuss several methods of automated segmentation as well as further processing including mesh generation. Two medical applications are considered: the numerical assessment of the Fractional Flow Reserve in the coronary network and the numerical simulation of electrocardiographic measurements.

Reference

A. Danilov, G. Kopytov, Yu. Ivanov, R. Pryamonosov, S. Simakov, Yu. Vassilevski, A. Yurova. Patient-specific models in human physiology. Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2015, v. 30(3).

13:00 – 13:30. Е. Казанцев (National Institute for Research in Computer Science and Control, Grenoble, France), К. Казанцева (J. Fourier University, Grenoble, France). Вариационное усвоение данных для оптимизации граничных условий в моделях океана.

В данном обзоре описывается развитие идей Гурия Ивановича Марчука в области вариационного усвоения данных для моделей океана. Особое внимание уделяется оптимизации граничных условий на твердых границах. Рассматриваются как идеализированные, так и реалистичные конфигурации моделей. Показано, что такая оптимизация позволяет определить наиболее чувствительные операторы модели и существенно приблизить решение модели к усваиваемым данным.

13:30 – 14:00. Е.М. Володин (Институт вычислительной математики РАН, Москва). Модель земной климатической системы ИВМ РАН.

Рассматриваются основные компоненты модели земной климатической системы: динамика атмосферы и океана, углеродный цикл, химия атмосферы, аэрозольный блок. Суммируются основные итоги участия климатической модели в программе CMIP5. Обсуждаются новые возможности модели и ее предполагаемое участие в программе CMIP6.

14:00 – 14:30. Закрытие конференции.