



Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН



**Задачи цифровых двойников
научных установок класса
мегасайенс и большие
вычисления**

Марченко М.А., Косяков Д.В.

ИВМиМГ СО РАН

Консорциум «Комплексные цифровые
двойники ЦКП СКИФ»

Суперкомпьютерные дни в России
Семинар "Цифровые двойники технических и природных систем"
25.09.2023

План доклада

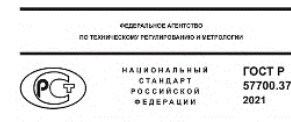
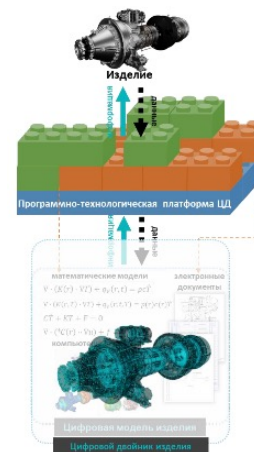


- Мировой опыт разработки цифровых двойников больших научных установок.
- Разработка цифровых двойников в СО РАН: цифровые двойники технических систем

Цифровой двойник природной или технической системы

Определение цифрового двойника изделия по ГОСТ Р 57700.37-2021 «Компьютерные модели и моделирование. Цифровые двойники изделий. Общие положения»

Система, состоящая из цифровой модели изделия и двусторонних информационных связей с изделием (при наличии изделия) и (или) его составными частями.



Компьютерные модели и моделирование
ЦИФРОВЫЕ ДВОЙНИКИ ИЗДЕЛИЙ
Общие положения

Идентификация

Март
Российская Федерация
2021

Цифровые двойники (процессов, объектов, изделий) как объединяющая концепция

- Объединение различных моделей
- Задачи усвоения данных, идентификация структур и параметров (работа с данными)
- Задачи управления (работа с критериями оптимальности)
- Единая инфраструктура (программные интерфейсы, цифровой «полигон», визуализация и т.д.)

В литературе: Digital Twin DIGITAL AIR [Zlatev, Zahari / Dimov, Ivan Using a Digital Twin to Study the Influence of Climatic Changes on High Ozone Levels in Bulgaria and Europe // Atmosphere , Vol. 13, No. 6 MDPI AG p. 932 2022-06] :

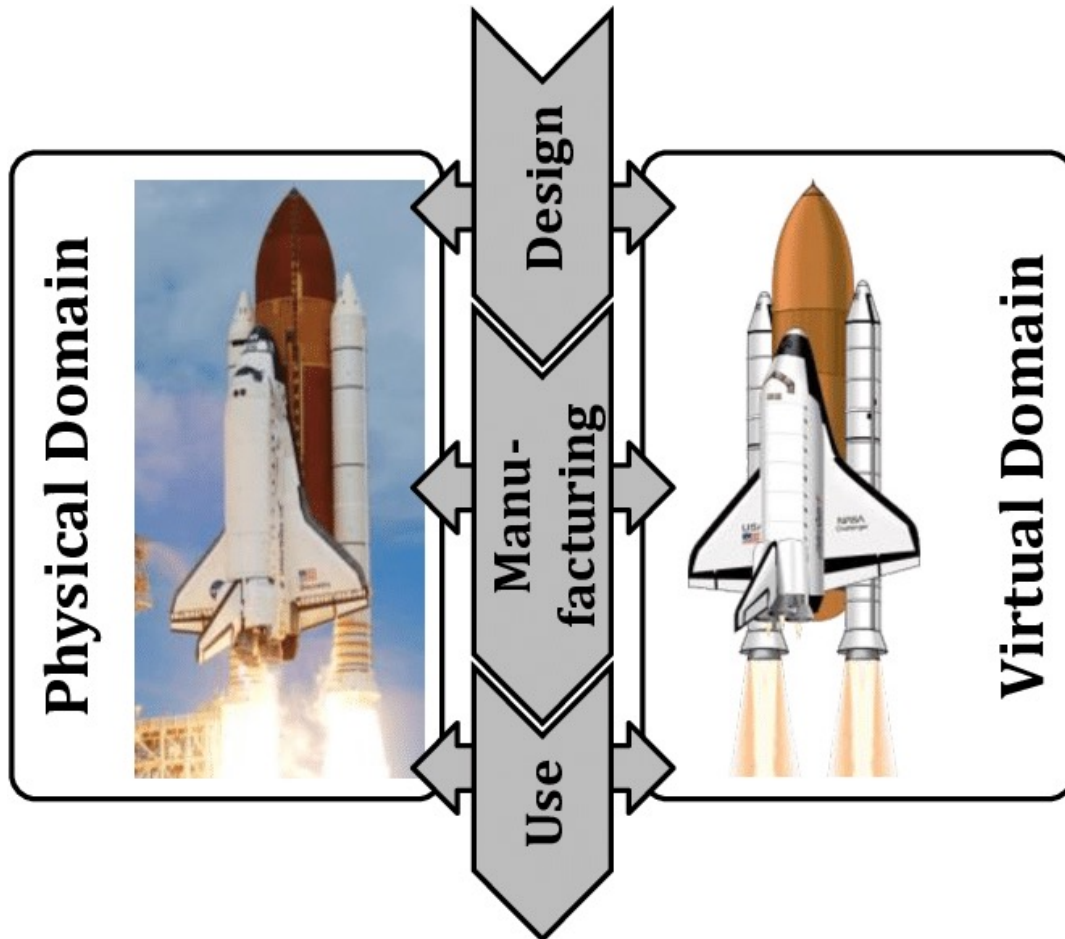
- many numerical algorithms,
- several splitting techniques,
- a lot of graphical tools,
- a series of useful scenarios,
- very large files of meteorological and emission data,
- a big set of geographical information (for example, information about many cities in Europe and about the borders of the European countries).
- presents in an accurate way all the relevant processes in the air including advection, diffusion, and chemical reactions.

Майкл Гривз



представил эту концепцию во время презентации в Мичиганском университете в 2002 году, на мероприятии для представителей индустрии, посвященном созданию центра управления жизненным циклом продукта (PLM). Позже Гривс расширил эту идею в курсе лекций и изложил в техническом документе [1], а также в последующей статье 2016 года, написанной в соавторстве с Джоном Викерсом [2].

- Grieves M. Digital twin: manufacturing excellence through virtual factory replication: White Paper. 2014. P. 1–7.
- Grieves M., Vickers J. Digital twin: Mitigating unpredictable, undesirable emergent behavior in complex systems // Transdisciplinary Perspectives on Complex Systems: New Findings and Approaches. 2016. P. 85–113.



Уже в 2011 г. появилась первая журнальная статья по этой теме [3]. В ней исследовалось, как можно эффективно использовать цифровые двойники для прогнозирования срока службы конструкции самолета. В 2012 году NASA формализовало определение цифровых двойников и подчеркнуло их потенциальное применение в аэрокосмической отрасли [4].

3. Tuegel E.J. et al. Reengineering aircraft structural life prediction using a digital twin // International Journal of Aerospace Engineering. 2011.

4. Glaessgen E.H., Stargel D.S. The digital twin paradigm for future NASA and U.S. air force vehicles. 2012.

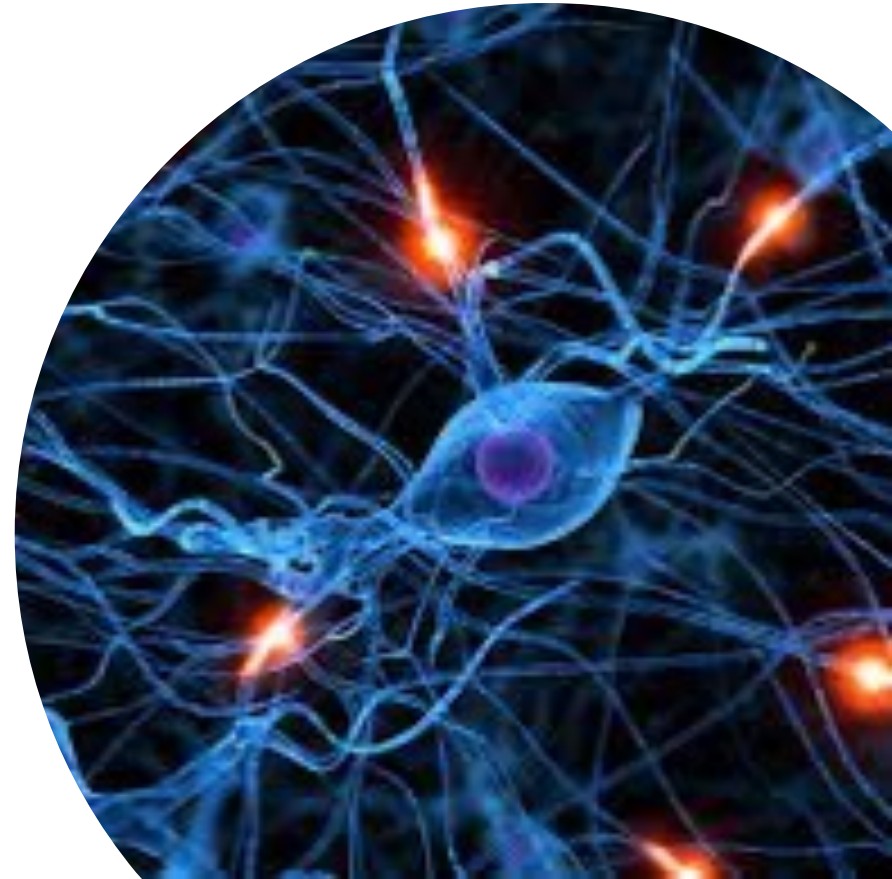
Предпосылки и ключевые технологии

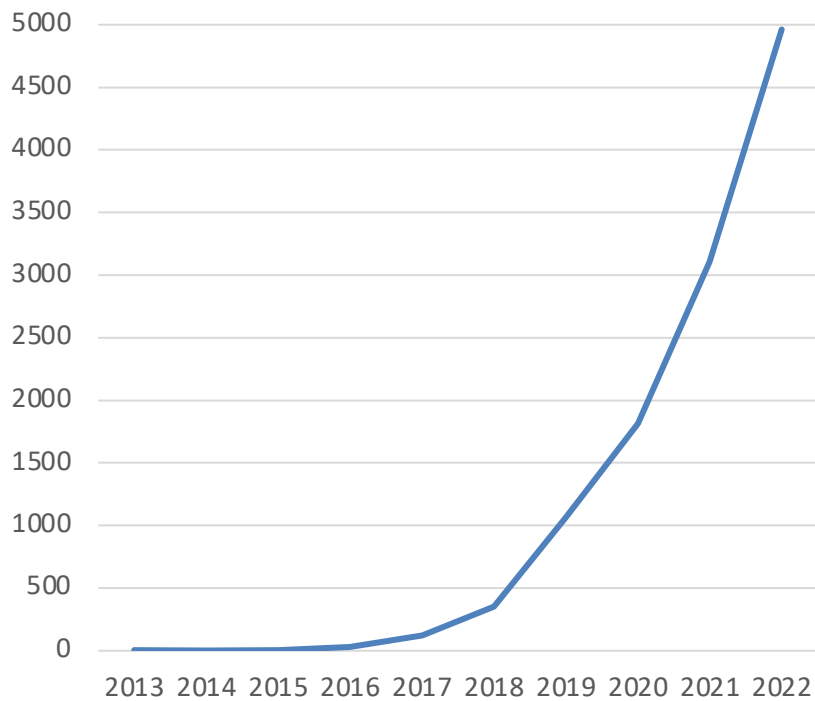
- САПР
- Компьютерное моделирование
- Интернет вещей (IoT)
- Промышленные системы управления (ICS)
- Индустрия 4.0
- Кибер-физические системы



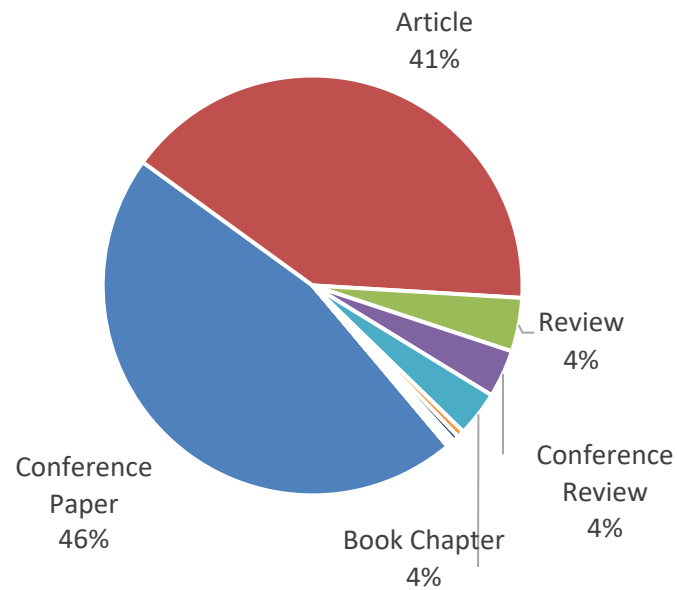
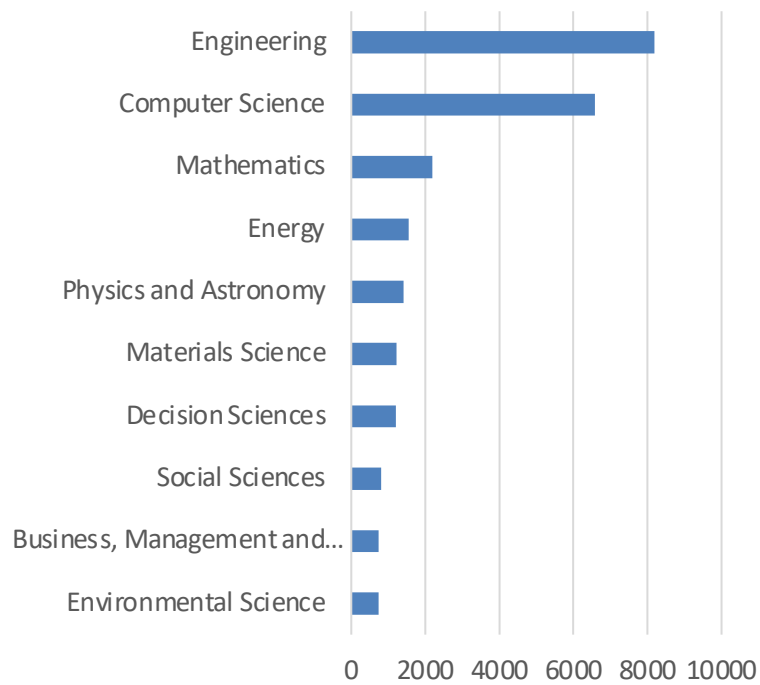
Нейронные сети

Достижения последних лет в области искусственного интеллекта, а именно в технологиях нейронных сетей дали еще один импульс развитию концепции ЦД. Нейронные сети позволяют строить на основе обучения на потоке реальных данных компьютерные симуляции сложных физических систем по принципу "черного ящика", что особенно полезно в случае невозможности или высокой сложности применения более традиционного численного моделирования. Таким образом технологии искусственного интеллекта являются одной из основных компонентов, влияющих на развитие концепции ЦД.





Scopus: количество публикаций и ведущие страны



Scopus: области исследований и типы документов

Определение ЦД

Гривз и Викарс:

Цифровой двойник представляет собой набор виртуальных информационных конструкций, которые полностью описывают потенциальный или реальный физически производимый продукт от микроатомного до макрогеометрического уровня

Глассеген и Страгель:

Цифровой двойник состоит из трех основных элементов: физического продукта, виртуального продукта и потоков данных, связывающих физический и виртуальный продукты

Ключевые атрибуты

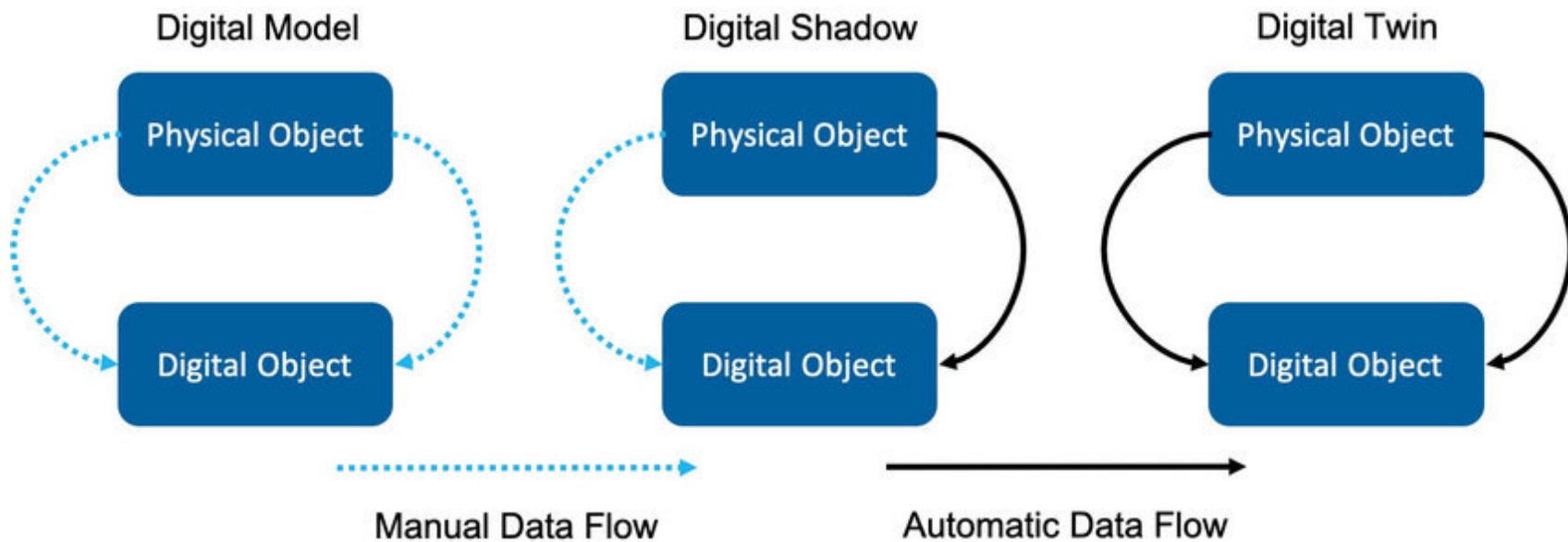
- Отражение в реальном времени: цифровые двойники включают в себя как физическое, так и виртуальное пространство, при этом виртуальное пространство служит точно синхронизированным и точным отражением физического пространства.
- Саморазвитие: цифровые двойники поддерживают обновление данных в режиме реального времени, что позволяет постоянно улучшать виртуальные модели, сравнивая их параллельно с их физическими аналогами.

Tao F. et al. Digital twin-driven product design, manufacturing and service with big data // International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2018. Vol. 94, № 9–12. P. 3563–3576.

Взаимодействие и конвергенция. Эту функцию можно рассматривать с трех точек зрения:

- Взаимодействие и конвергенция в физическом пространстве. Цифровые двойники обеспечивают всестороннюю интеграцию всех потоков, элементов и сервисов, обеспечивая взаимосвязь данных, генерируемых на различных этапах.
- Взаимодействие и конвергенция между историческими данными и данными в реальном времени: цифровые двойники зависят от разнообразных источников данных, включая экспертные знания и информацию в реальном времени из всех внедренных систем, что способствует более глубокому анализу и более эффективному использованию данных.
- Взаимодействие и конвергенция между физическим и виртуальным пространствами: в цифровых двойниках физическое и виртуальное пространства взаимосвязаны бесшовными каналами, обеспечивающими легкое взаимодействие между двумя пространствами.

Таксономия и вольности определения

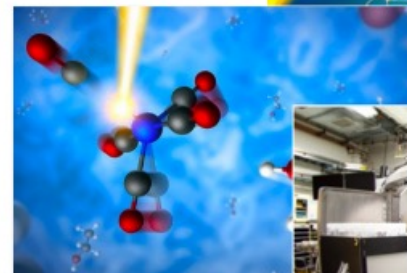


Stanford Linear Accelerator Center (SLAC)

Доклад на конференции

- Edelen A. AI/ML and Its Operational Challenges at SLAC's Accelerators and Collaborating Facilities. 2021.



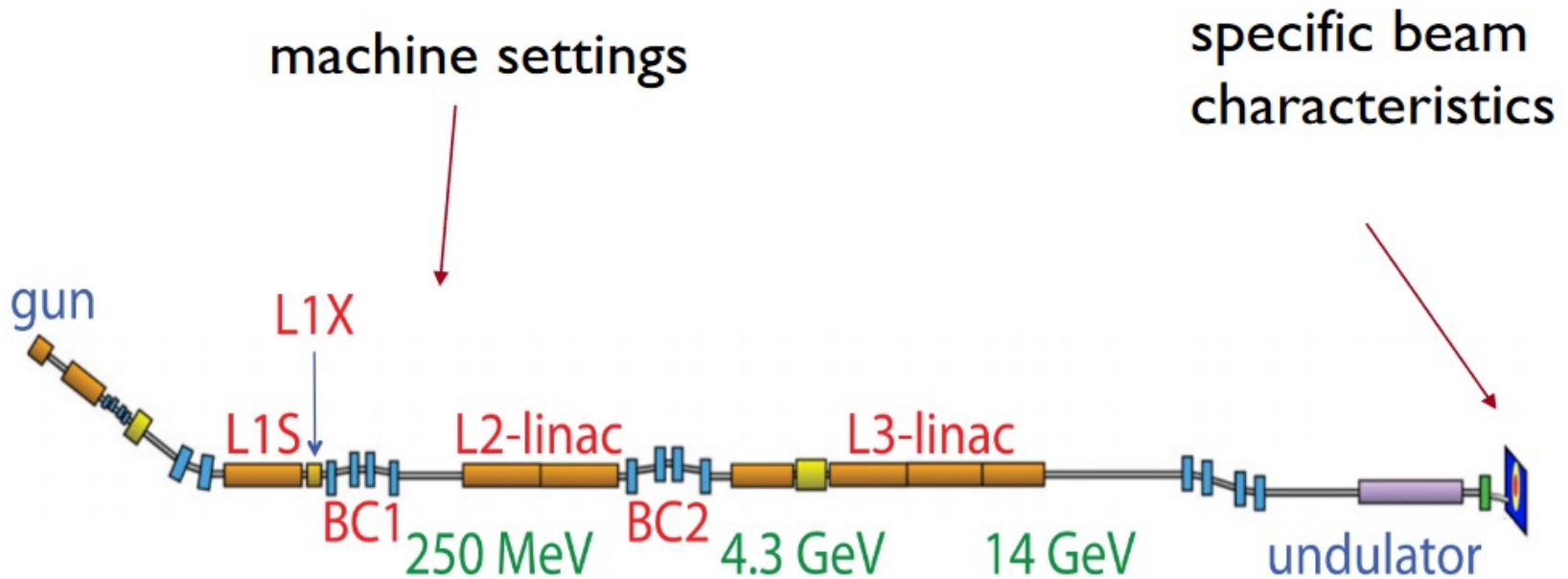


1,062 experiments in 2016

~1023 papers since 2009

Experimenters come for a few days – a week

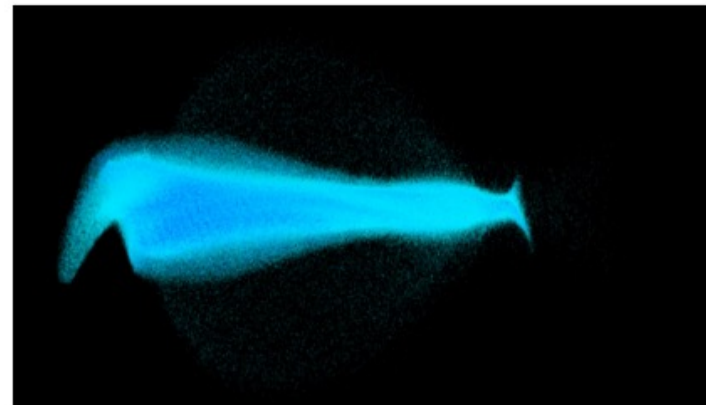
**beam duration, x-ray wavelength etc.
adjusted for each experiment**

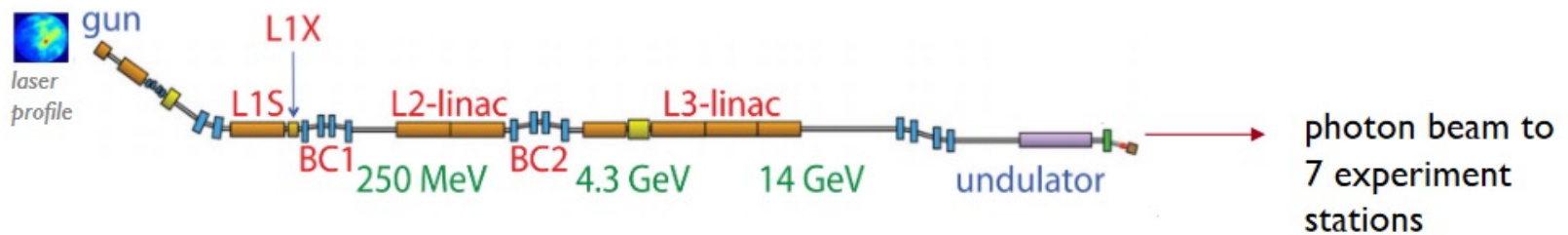


Beam exists in 6-D position-momentum phase space

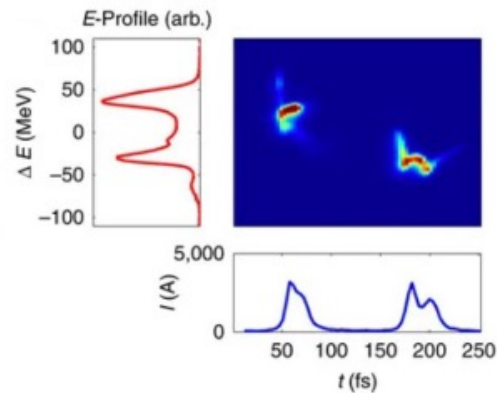
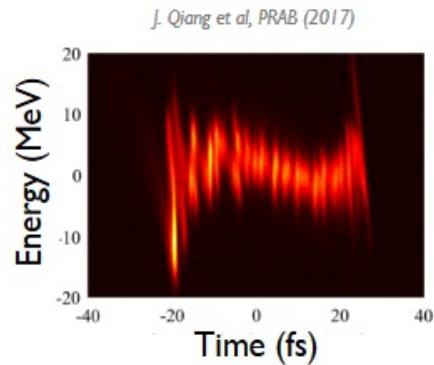
Measure 2-D projections or reconstruct based on perturbations of upstream controls

Can have dozens-to-hundreds of controllable variables and hundreds-of-thousands to measure

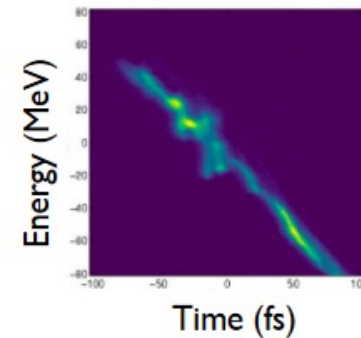




A. Marinelli, et al., Nat. Commun. 6, 6369 (2015)



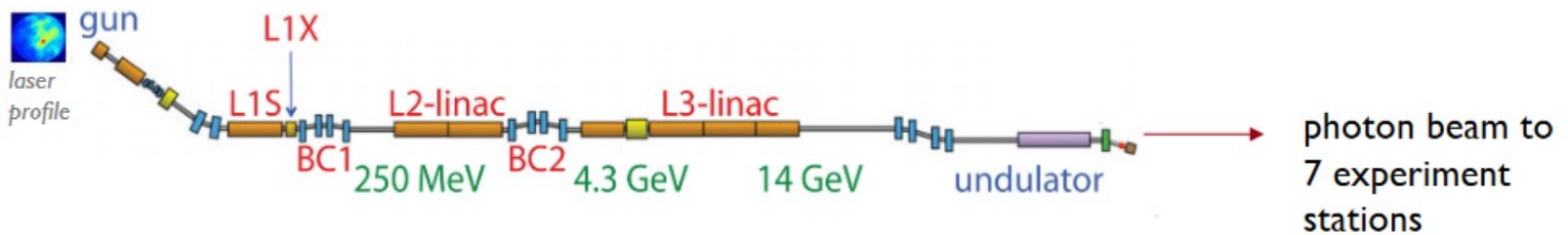
A. Marinelli, IPAC'18



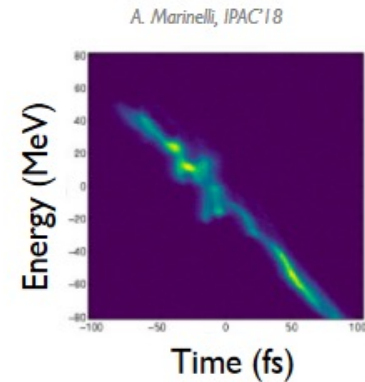
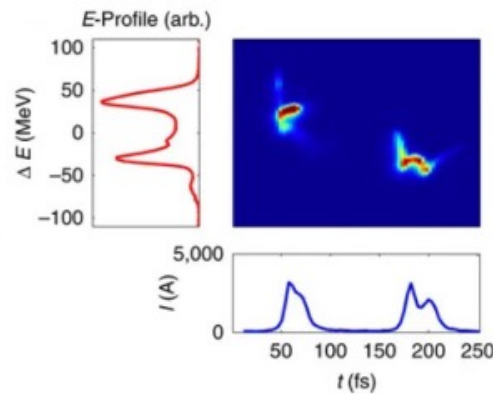
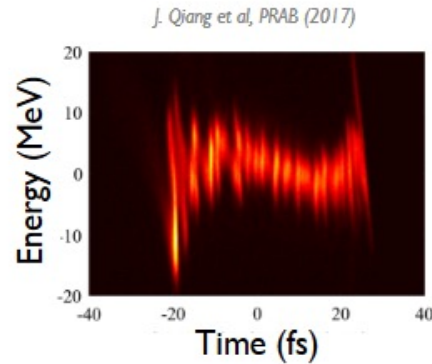
~400 hours spent tuning per year

Changing configurations roughly 2-5 times per day

Average setup time is ~30 minutes

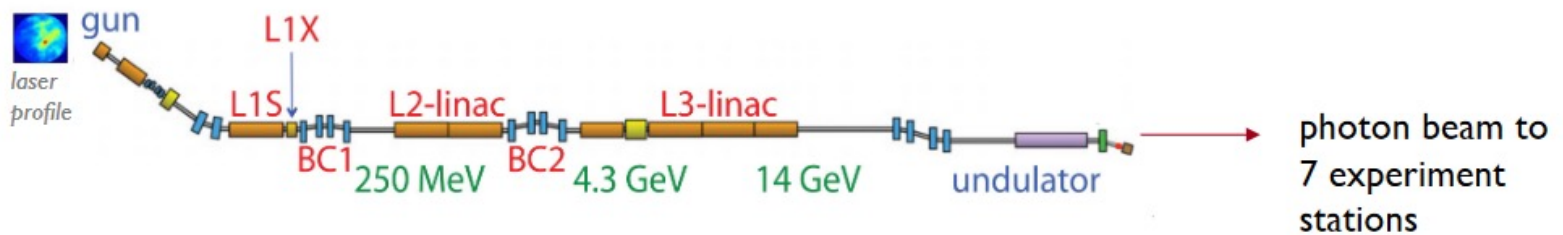


A. Marinelli, et al., Nat. Commun. 6, 6369 (2015)

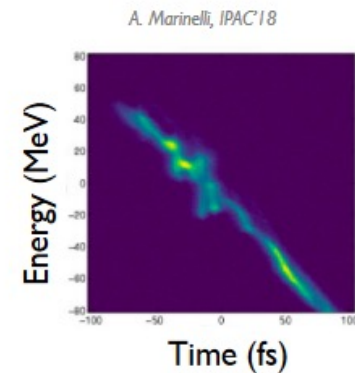
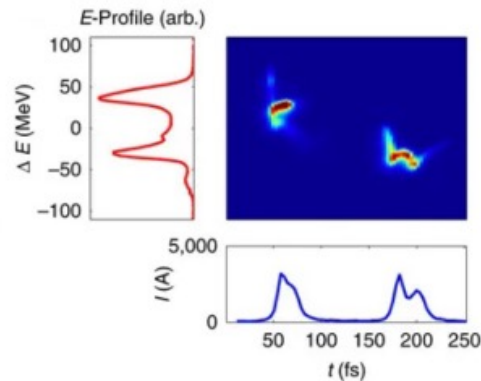
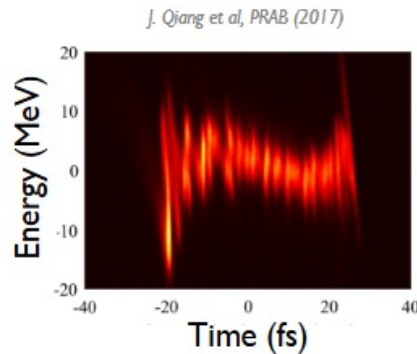


Approximate Annual Budget: \$145 million
 Approximate hours of experiment delivery per year: 5000
 About \$30k per experiment hour to run!

400 hours hand-tuning in a year \longrightarrow \$12 million value
 ~10 additional experiments



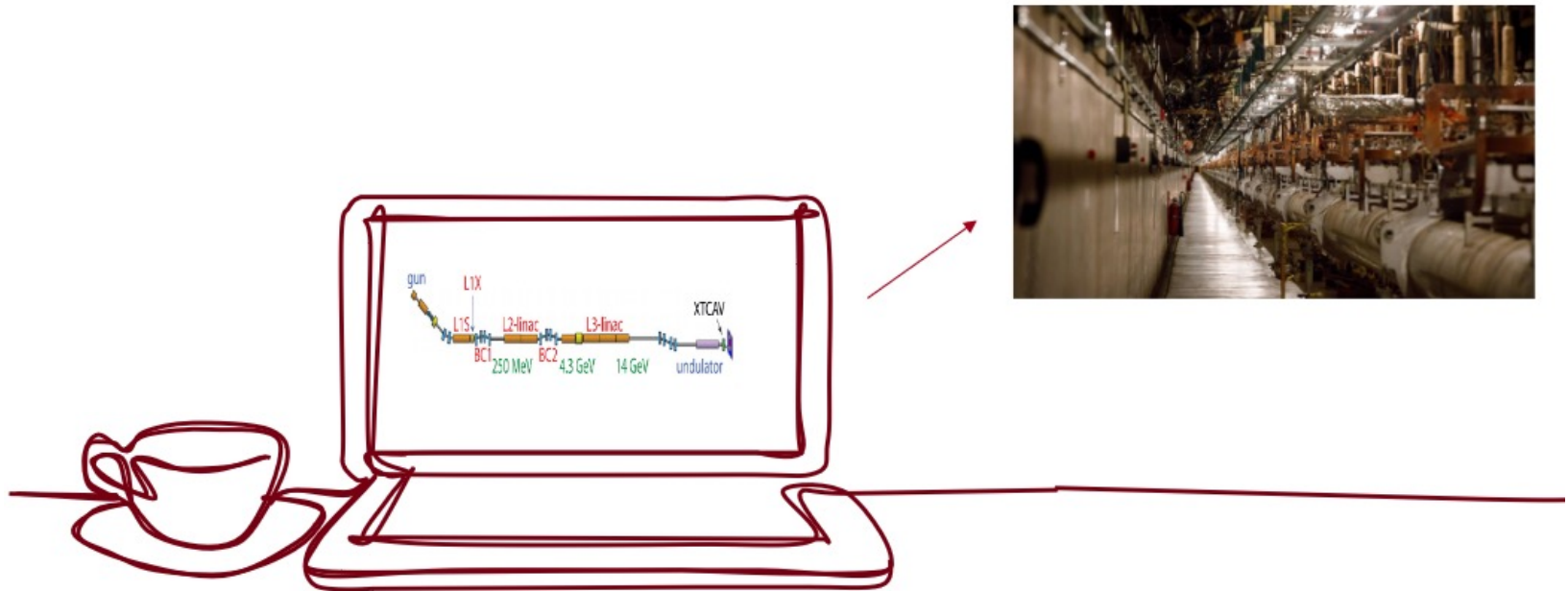
A. Marinelli, et al., Nat. Commun. 6, 6369 (2015)



→ efficient tuning matters to maximize **science-per-dollar** spent

→ **new machine configurations** enable new science (e.g. attosecond pulses),
but are difficult to bring to operation initially

In a perfect world...



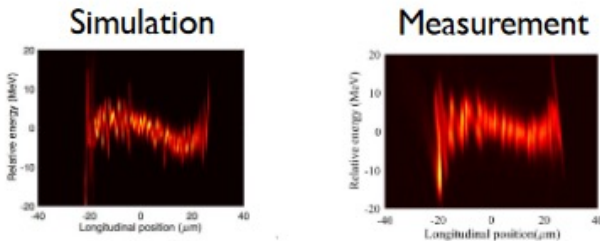
fast, accurate model → predict perfectly

find some knobs that give us the beam we want and apply those
to the machine

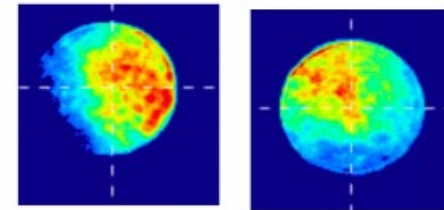
In reality things are much more difficult...



computationally expensive simulations

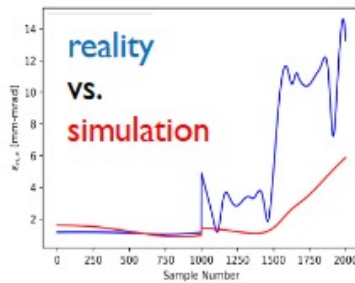


fluctuations/noise
(e.g. laser spot)

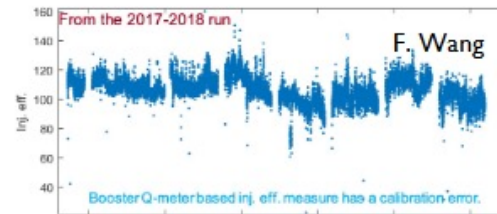


“10 hours on thousands of cores at the NERSC”

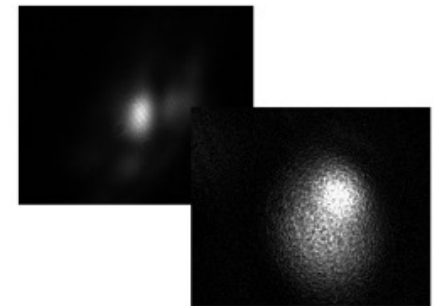
J. Qiang, et al, PRSTAB30, 054402, 2017



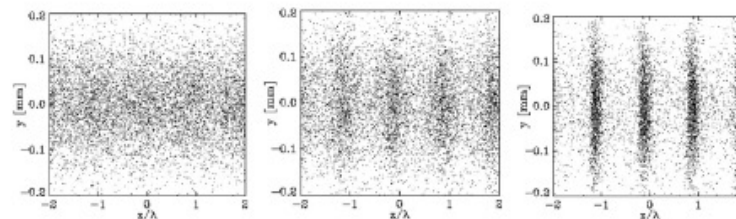
many small, compounding sources of uncertainty



hidden variables / sensitivities



drift over time

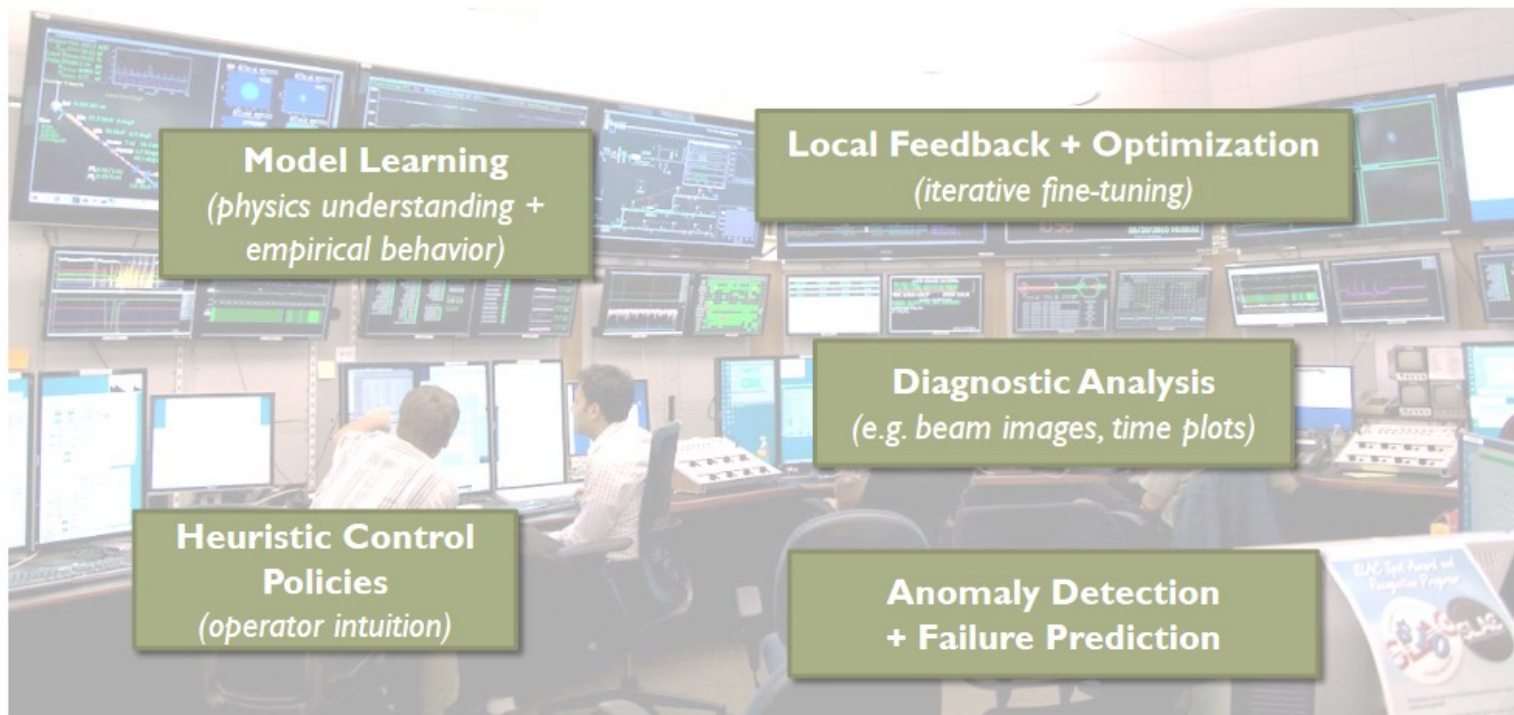


nonlinear effects / instabilities

We rely heavily on operators for day-to-day control tasks ...



We rely heavily on operators for day-to-day control tasks ...



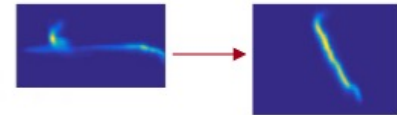
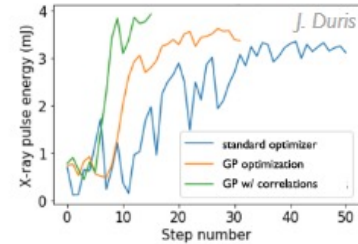
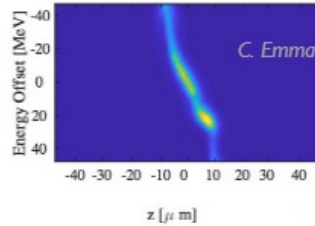
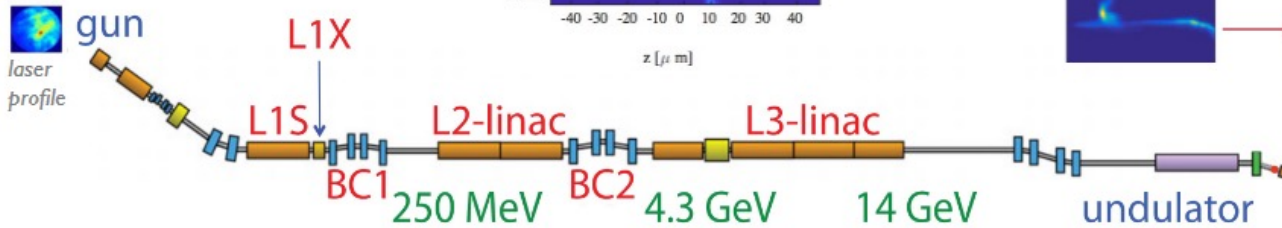
...many analogous techniques in optimization, machine learning, computer vision, etc.

Several major areas for ML to play a role

anomaly detection
failure prediction

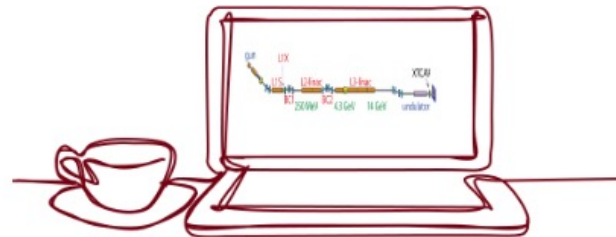
diagnostics
(reconstruct / analyze beam)

automated control
+ optimization



incorporate
physics
information

extract unexpected
relationships
(feed into control / design)



digital twins + online modeling
(planning, model-based control, finding differences between sim/machine)

+ need uncertainty
quantification for all

less ← assumed knowledge of machine → more

Model-Free Optimization

Observe performance change after a setting adjustment

→ *estimate direction toward improvement*

gradient descent
simplex

Model-guided Optimization

Update a model during each search step

→ *use model to help select the next point*

Bayesian optimization
Reinforcement learning

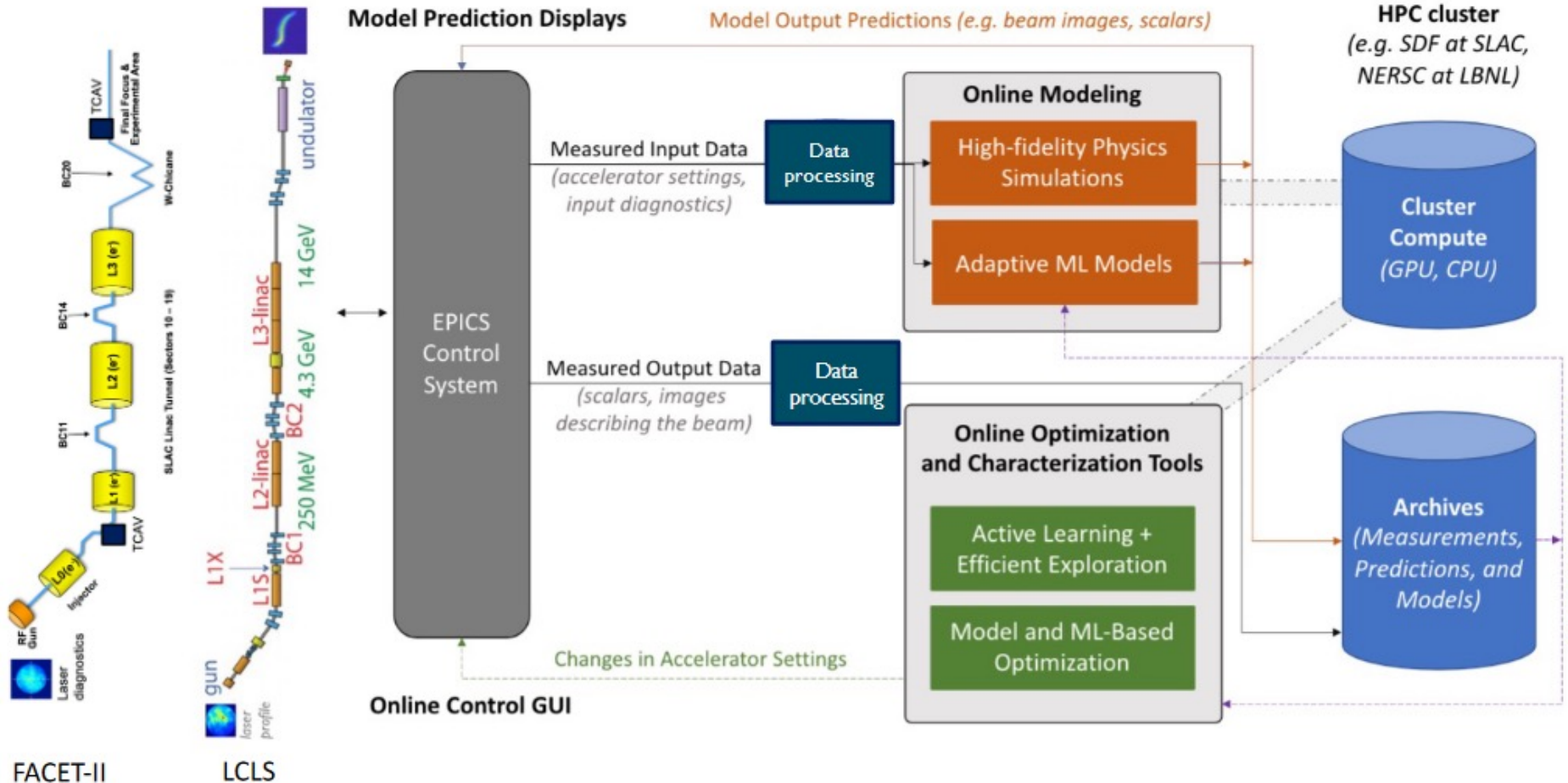
Global Modeling + Feedforward Corrections

Make fast / accurate system model

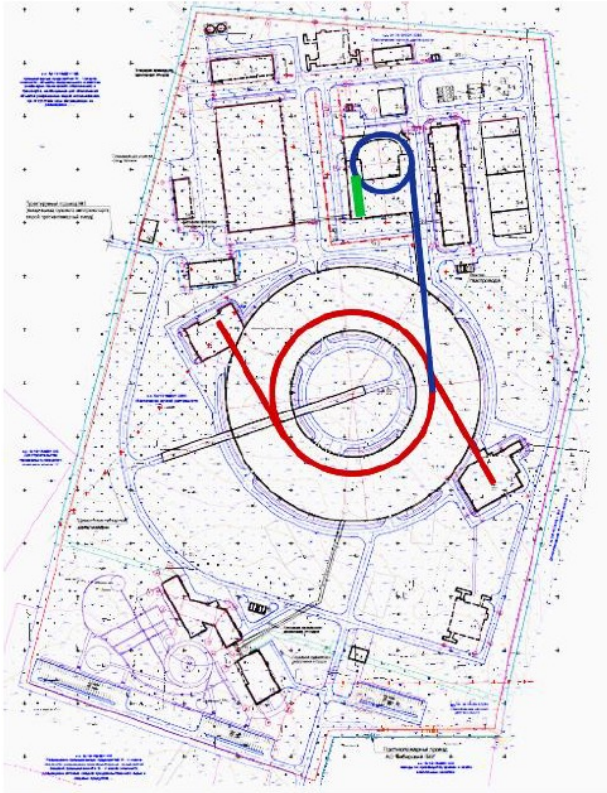
→ *provide guess for good settings*
→ *make predictions about machine*

ML system models +
inverse models

Where we're headed: integration with HPC and continuous online learning



Применение: цифровой двойник ЦКП «СКИФ»

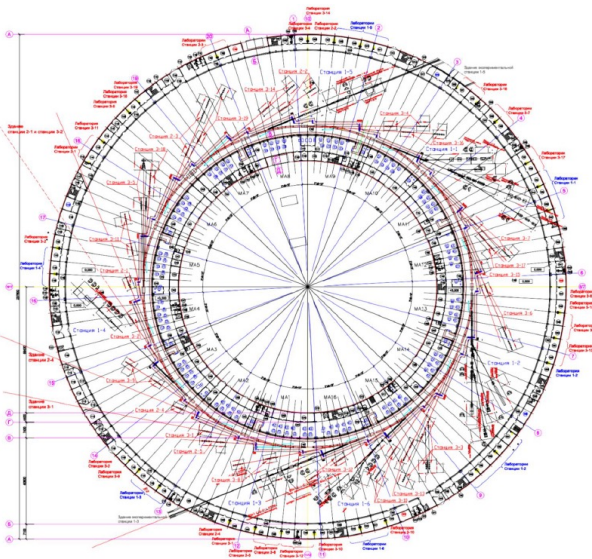


- ЦД ЦКП «СКИФ» (ускорительный комплекс и экспериментальные станции) на этапе эксплуатации - многоуровневая информационно-математическая модель с двухсторонними связями с оборудованием и системой АСУ, воспроизводящая ключевые аспекты функционирования оборудования и содержащая следующую информацию:
 - ✓ данные о функциональных системах СКИФа
 - ✓ физико-математические модели процессов, элементов и систем, и взаимосвязей между ними (4D=3D+t)
 - ✓ данные об исследовательских методах
 - ✓ модели экспериментальных данных
 - ✓ описание потоков данных между элементами
 - ✓ система информационной безопасности
 - ✓ библиотека конструкторской документации

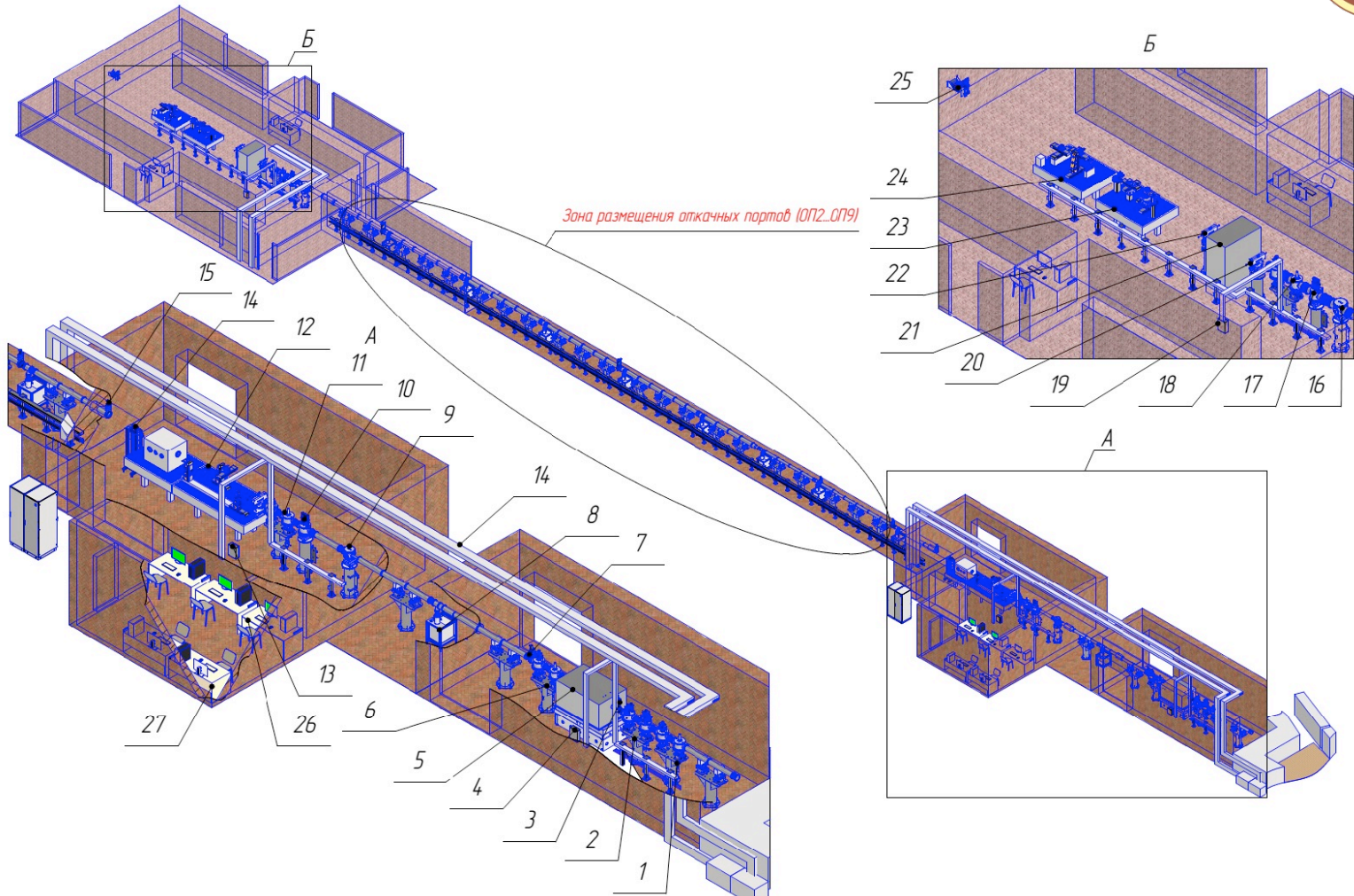
Цифровой двойник ЦКП «СКИФ»

Основные задачи ЦД на этапе эксплуатации:

- содействие в управлении оборудованием
- планирование экспериментов
- формирование «цифровой тени» оборудования, усвоение данных телеметрии и оценка параметров моделей
- проведение сценарных расчетов по моделям
- планирование модернизации оборудования, переход от планового ремонта к ремонтам по потребностям
- проектирование новых станций
- прогнозирование аварийных ситуаций
- учет сейсмичности
- управление экспериментальными данными
- обеспечение информационной безопасности
- обучение пользователей (тренажер)
- работа демонстрационного стенда



Станция 1-5 «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне»



Цифровой двойник экспериментальной станции

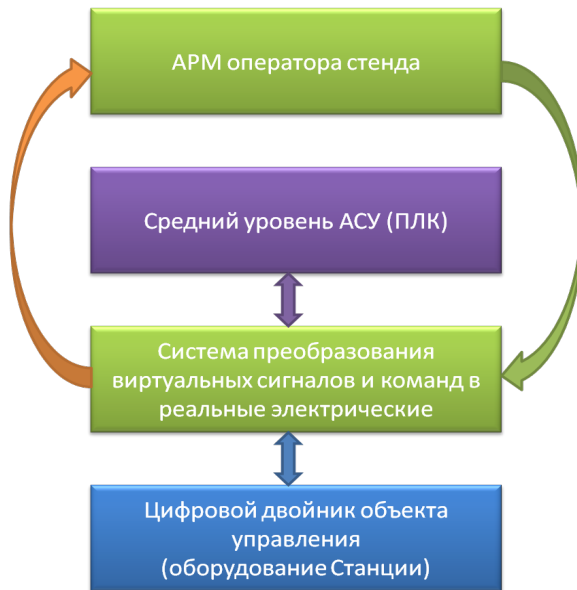
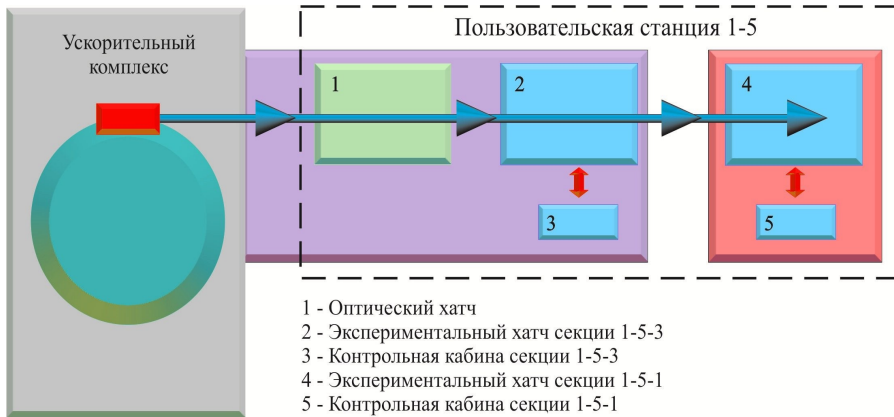


Схема полунатурного станда моделирования работы станции (hardware-in-the-loop)

В ЦД экспериментальной станции входит:

- данные об оборудовании станции (от фронтенда)
- физико-математические модели взаимодействия излучения с хатчами и пр.
- исследовательские методы по накоплению и обработке данных
- описание потоков данных между составными элементами станции
- библиотека конструкторской документации по станции

Задачи ЦД станции:

- повторяют задачи ЦД

Цифровой двойник – основа для системы принятия решений по управлению установкой



**Цифровой двойник,
работает синхронно
с установкой**

Рекомендация
по управлению

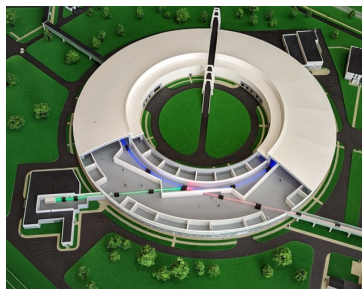
Информация о
действиях
оператора



Оператор

Телеметрия

Телеметрия,
«цифровая
тень»



**Установка мегасайенс
на этапе эксплуатации**

Управление

Эффекты от применения цифрового двойника установки мегасайенс



- Сокращение расходов на эксплуатацию
- Уменьшение риска аварий, поломок и сбоев
- Увеличение числа экспериментов
- Увеличение числа пользователей
- Уменьшение затрат на эксперименты
- Снижение затрат на ремонты и модернизацию
- Увеличение количества и качества научных результатов
- **В масштабах страны - увеличение экономических показателей по разработке и внедрения новых материалов, процессов и т.д.**



Приглашаем к сотрудничеству!

<https://icmmg.nsc.ru/>
marchenko@icmmg.nsc.ru

+ 7 (383) 330 83 53