

Информационные технологии

О. М. Белоцерковский

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ

Проникновение ЭВМ в различные области человеческой деятельности существенно расширило круг задач, подлежащих математическому решению. В статье приведены методические положения, играющие важную роль при организации процесса математического моделирования на супер-ЭВМ. Материал будет полезен молодым ученым, аспирантам и студентам, начинающим свой путь в науке.

Численное моделирование является важным и эффективным инструментом исследования там, где не совсем ясна физическая картина изучаемого явления, не познан до конца внутренний механизм взаимодействия. Оно сочетает в себе многие черты как теории, так и эксперимента, и его часто называют «третьим методом» познания. В процессе вычислительного эксперимента происходит, по существу, уточнение исходной физической модели. Путем расчетов на ЭВМ различных вариантов ведется накопление фактов и результатов, что в конечном счете дает возможность произвести отбор наиболее вероятных ситуаций.

Следующей ступенью иерархической лестницы «компьютеризации» является создание (но уже на базе «предметных» математических моделей) экспертных систем и систем автоматизированного проектирования (САПР), что позволяет принципиально изменить положение дел и качественно поднять уровень разработок в области проектирования новой техники. САПР дает возможность автоматизировать практически весь процесс разработок, от рутинной части инженерного труда (обработки текстовой и графической информации, выпуска технической документации и др.) до проектирования сложных технических систем, что было совершенно недоступно в «домашинный» период. Именно триада: «математическая модель» (вычислительный эксперимент) — экспертная система — САПР — и есть та рациональная основа, которая позволяет резко интенсифицировать опытно-конструкторские разработки.

Во многих случаях чрезвычайно затруднено моделирование явления в лабораторных и натуральных условиях из-за больших технических сложностей и дороговизны эксперимента, не говоря уже о том, что данные опытных измерений во многих случаях носят весьма ограниченный характер. Например, такая ситуация возникает при проектировании многотоннажных судов — выборе оптимальной формы, прогнозировании поля скоростей в следе за кормой, расчете динамических и прочностных характеристик гребных винтов и др. По существу, реальные характеристики судна можно получить только после его постройки и ходовых испытаний. И цена ошибки может быть очень большой.

Активное использование методов численного моделирования [2–9] и распознавания образов [10] при разработке на их базе экспертных систем и систем автоматизированного управления позволяет резко сократить сроки научных и конструкторских разработок. В тех случаях, когда реальный эксперимент трудно осуществим и информация о процессе носит нечеткий, косвенный характер, математическое моделирование служит практически единственным инструментом исследования. Однако при этом ни в коей мере не должна принижаться принципиальная роль физического эксперимента. Опыт всегда останется основой всякого исследования, подтверждающего (или отвергающего) схему и решение при теоретическом подходе.

Одной из областей успешного применения математического моделирования является механика сплошных сред и физика плазмы. Уравнения, описывающие происходящие здесь явления, представляют собой наиболее сложную (по сравнению с другими областями математической физики) систему интегральных или дифференциальных уравнений в частных производных. Поэтому возникает потребность в использовании наиболее современных численных методов для решения этих уравнений. Математические трудности изучения такого типа проблем связаны с «сильной» нелинейностью и нестационарностью уравнений, а также с большим числом независимых переменных (пространственно-нестационарные задачи).

Особый интерес представляют численные методики, позволяющие *количественно* исследовать некоторые явления и процессы, которые ранее имели лишь *качественное* описание, например, в экономике, медицине и др. [11–13].

Что касается проблем построения систем автоматизации проектирования, то здесь обычно выделяют *три концептуальных уровня*: задача синтеза сложных технических систем (СТС) данного целевого назначения (сравнительный анализ альтернатив решения и их отбраковка, «сжатие» множества альтернатив и др.); задача анализа СТС данного конструктивного облика (определение характеристик проектируемых СТС на базе проверочных расчетов, установление адекватности предполагаемых функциональных характеристик СТС и др.); наконец, задача формализации и создание общего системного программирования. Если первые два уровня составляют проблемно-ориентированную подсистему, т. е. «производящую» отрасль САПР, то последняя задача — это «инфраструктура» САПР.

Основополагающей в проблеме «оптимального САПРа» является, на наш взгляд, и задача

алгоритмического обеспечения САПР (так, фирмой «Боинг» были тщательно проанализированы результаты примерно 700 расчетных работ, проведенных на ЭВМ в 70–80-х годах; оказалось, что 70 % конечных результатов расчетов были неверными и причиной этого явилось использование неадекватных математических моделей).

Таким образом, *разработка математических моделей и на их базе интеллектуальных экспертных систем (ИЭС) в механике сплошных сред, медицине и др., адекватных рассматриваемым физическим процессам или объектам, является основополагающим фактором достоверности создаваемых систем автоматизации проектирования [10–15]. Мы сознательно выделили механику сплошных сред в качестве предметной области, поскольку, во-первых, она покрывает чрезвычайно широкую сферу приложений САПР, во-вторых, известные в этой области математические модели являются наиболее сложными с точки зрения их реализации на ЭВМ и, в-третьих, несмотря на имеющийся опыт в решении прикладных задач механики сплошных сред, эта предметная область выдвигает ряд фундаментальных проблем, решение которых существенно повлияет на успех создания САПР в смежных предметных областях [15]. Отметим еще одну очень важную особенность рассматриваемых проблем.*

Современные супер-ЭВМ выполняют, как известно, миллионы и миллиарды операций в секунду. Это открыло принципиально новые возможности для количественной переработки информации. ЭВМ проникли практически во все области человеческой деятельности, что существенно расширило круг задач, подлежащих математическому решению. При этом выяснилось, что постановка многих задач научно-технического прогресса не укладывается в постановки задач теоретической математики, которые связаны с «принципом абсолютной точности», лежащим в основе формальной логики Аристотеля. В качестве типичных примеров могут быть названы задачи обработки результатов научных исследований, оптимального планирования и многие другие.

Для возможности применения ЭВМ необходимо иметь: 1) математическую модель поставленной задачи; 2) устойчивый метод ее решения; 3) устойчивый алгоритм, построенный на базе этого метода; 4) программу для ЭВМ, соответствующую такому алгоритму.

Решения *неустойчивых задач с неточными данными* существенно меняются даже при сколь угодно малых изменениях исходных данных. Алгоритм воспроизводит решение, соответствующее исходным данным. В этом случае его реализация на ЭВМ будет выдавать неустойчивые результаты. Итак, реализация на ЭВМ решений неустойчивых задач в рамках «концепции точности» постановки задач теоретической математики не гарантирует получения устойчивых результатов при рассмотрении неустойчивых задач. Методы решения на ЭВМ неустойчивых задач с неточными данными относятся к классу математических задач, выходящих за пределы теоретической математики, и часто встречаются в постановках задач научно-технического прогресса. *Проблема выделения устойчивого решения, адекватного рассматриваемому процессу, является здесь центральной.*

Анализ эволюции математических моделей, используемых в механике сплошных сред, показывает, что эволюция осуществлялась в основном по пути количественного накопления факторов, определяющих исследуемый процесс или явление. Прогноз, построенный на основе экстраполяции традиционных подходов к математическому моделированию, например, обтекания самолета потоком вязкого сжимаемого газа, показал, что для численной реализации модели потребуется вычислительная система с производительностью 10^{12} – 10^{14} (и более) операций в секунду и с объемом памяти 10^{12} слов. Оставляя в стороне вопрос о технической реализуемости этих требований, отметим еще одно чрезвычайно важное обстоятельство. Анализ влияния погрешностей вычислений при таких объемах арифметических операций показывает, что традиционные подходы к построению численных методов не могут обеспечить требуемую надежность результатов расчетов в этих случаях. Не спасает при этом и разумное увеличение длины машинного слова. Здесь необходима обработка весьма больших массивов информации, и проблема «*арифметической избыточности*», связанная с накоплением погрешностей вычислений (особенно при расчетах на больших временных интервалах), является практически неразрешимой.

Катастрофическое увеличение объемов арифметических затрат связано не только с арифметической сложностью проводимых вычислений, но в ряде случаев и с физической сущностью решаемых задач и несовершенством используемых «традиционных» алгоритмов. Вполне очевидно, что определяющим качеством проектируемых изделий (сложных технических систем) является надежность их функционирования в течение максимально возможно длительного промежутка времени. С точки зрения математического (численного) моделирования это означает необходимость обеспечения возможности исследования поведения модели в течение сколь угодно большого временного интервала. К этому следует добавить и существенно «динамический» характер функционирования проектируемых моделей, обусловленный изменением во времени внешних воздействий.

С математической точки зрения указанное выше требование означает, что используемая «имитационная» модель (система определяющих уравнений с граничными условиями) для элемента «в среднем» должна обладать свойством *асимптотической устойчивости* (или быть максимально близкой к такой модели). Для *асимптотически устойчивых алгоритмов основным условием получения решения является наличие*

диссипативности (т. е. невозрастания погрешностей при расчетах на больших временных интервалах) [7]. Многие из существующих в настоящее время численных моделей в механике сплошных сред этим свойством, вообще говоря, не обладают.

Выход из такого положения мы видим в разработке принципов рационального численного моделирования. Видимо, в ближайшем будущем не столько увеличение быстродействия и памяти вычислительных систем (что потребует огромных материальных затрат), сколько создание рациональных моделей и интеллектуальных экспертных систем обеспечит успех в решении проблем создания САПР в различных предметных областях.

Эволюционность, многомерность, диссипативность и нелинейность — вот характерные черты подавляющего числа решаемых в настоящее время практических задач ([2–7] и др.). Отметим в этой связи задачи об изучении динамики тел, движущихся в газе и жидкости, а также динамики океана и атмосферы, исследования отрывных течений, турбулентности, развития гидродинамических неустойчивостей, скоростного взаимодействия твердых тел, процессов фильтрации и др. Существенная разномасштабность, нелинейность и нестационарность процессов, составляющих эти сложные явления, заставляет по-новому подходить к построению численных моделей. Традиционные «классические» подходы здесь малоэффективны и требуют затрат большого количества машинного времени, что зачастую делает эти модели нереализуемыми.

Одним из возможных выходов представляется отказ от общепринятого метрического (точечного) оценивания результатов и переход к структурному [7–9]. Переход к структурному соответствию открывает новые перспективы в построении устойчивого решения и установлении его адекватности исследуемому явлению. Это обстоятельство становится особенно важным, когда речь заходит о моделировании физических процессов на основе законов сохранения в их наиболее общем дискретном представлении на широких классах функций или с использованием статистических подходов.

Таким образом, моделирование на базе законов сохранения с помощью структурного описания среды (крупных частиц, конечных элементов, дискретных вихрей и т. п.) с применением принципа асимптотической (структурной) устойчивости и составляет основу построения методов рационального численного моделирования [7]. Здесь, по существу, выстраиваются имитационные модели (макроуравнения для структурного элемента), адекватные рассматриваемым нелинейным процессам.

Актуальность разработки рациональных численных моделей, описывающих эволюцию сложных явлений, диктуется еще одним обстоятельством: в настоящее время мы подошли к проблеме создания интеллектуальных («гибридных») экспертных систем, позволяющих проводить прогноз поведения объекта или развития явления, процесса. Пример построения такой прогнозирующей системы в медицине описан в [13]. Опыт разработки экспертных систем показывает, что с содержательной точки зрения задача сводится к поиску информативных признаков, позволяющих распознать или идентифицировать данный объект (процесс, явление) в ряде или на фоне других объектов.

Проблема построения экспертных систем тесно соприкасается с *методами распознавания образов*. Центральная задача распознавания образов — построение на основе систематических теоретических и экспериментальных исследований простых вычислительных средств для отнесения формализованных описаний ситуаций и объектов к соответствующим классам. В основе такого отнесения (расознавания, классификации) лежит получение некоторой агрегированной оценки ситуации исходя из ее описания. При установлении соответствия между классами эквивалентности, заданными на множестве решений и множестве объектов распознавания (ситуаций), автоматизация процедур распознавания становится элементом автоматизации процессов принятия решений [10, 14].

Заключение

Нам представляется, что высказанные положения играют очень важную роль при организации процесса математического моделирования на супер-ЭВМ. Как отмечалось в начале, указанный процесс (и его реализация) и составляют суть численного эксперимента. Машина, в особенности супер-ЭВМ, позволяет получать сегодня «глобальные» решения таких задач, о решении которых еще 20–30 лет назад нельзя было и мечтать. Однако следует иметь в виду, что в ближайшем будущем именно разработка нового уровня BRAIN-WARE, т. е. оптимальных и конструктивных математических моделей (а не только мощности вычислительной техники) будет определять степень эффективности использования ЭВМ в фундаментальных и прикладных разработках при создании сложных технических систем. Это, на наш взгляд, магистральный путь развития новых информационных технологий. Более подробное описание затронутых здесь проблем можно найти в недавно вышедших сборниках статей [16, 17].

Литература

1. Дородницын А. А. Избр. труды. Т. 1, 2. М.: ВЦ РАН, 1997.
2. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов для решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.
3. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1967.
4. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры. 2-е изд, испр. М.: Физматлит, 2001. 320 с.
5. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1967.

6. Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы: (Введение в теорию). М.: Наука, 1977.
7. Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука, 1994.
8. Белоцерковский О. М. Численный эксперимент в турбулентности: От порядка к хаосу. М.: Наука, 1997.
9. Belotserkovskii O. M. Turbulence and Instabilities. M.: MIRT, 1999.
10. Журавлев Ю. И. Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики. М.: Наука, 1978. Вып. 3. С. 5–68.
11. Петров А. А. Экономика. Модели. Вычислительный эксперимент. М.: Наука, 1996. 12. Информатика и медицина. Сб. статей. М.: Наука, 1997.
13. Белоцерковский О. М., Виноградов А. В., Глазунов А. С., Журавлев Ю. И. и др. Прогнозирование исхода состояния при инфаркте миокарда // Докл. АН СССР. 1981. Т. 261. С. 1307–1310.
14. Уотерман Д. Руководство по экспертным системам. М.: Мир, 1989.
15. Грувер М., Зиммерс Э. САПР и автоматизация производства. М.: Мир, 1987.
16. Новое в численном моделировании: алгоритмы, вычислительные эксперименты, результаты. М.: Наука (Серия «Кибернетика: неограниченные возможности и возможные ограничения»), 2000. 247 с.
17. Компьютерные модели и прогресс медицины / Под ред. О. М. Белоцерковского, А. С. Холодова. М.: Наука (Серия «Кибернетика: неограниченные возможности и возможные ограничения»), 2001. 300 с.