

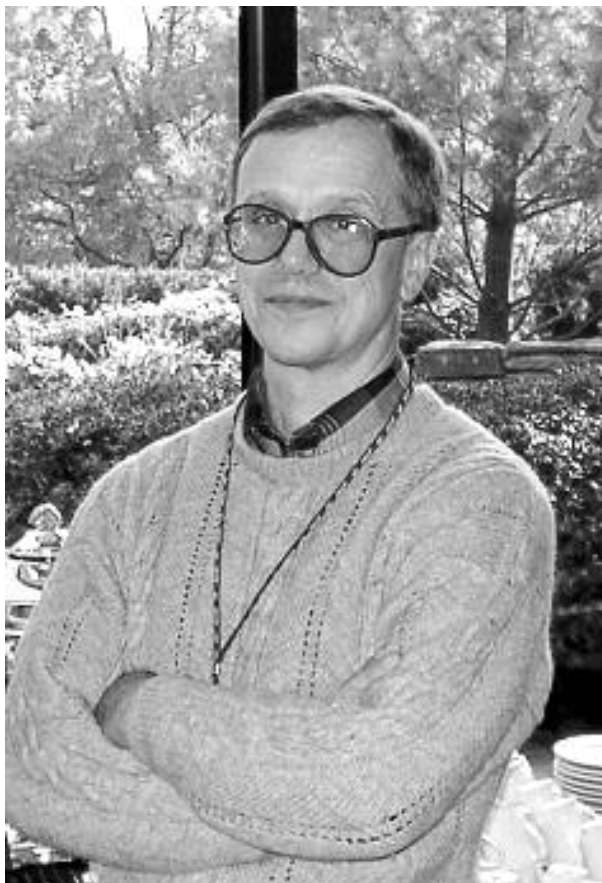
Некоторые проблемы теоретического и компьютерного моделирования

Физика не только дает нам (математикам) повод к решению проблем; она еще помогает нам найти к этому средства. Это происходит двояким путем. Во-первых, она дает нам предчувствия решения; во-вторых, подсказывает нам ход рассуждений.

Анри Пуанкаре

Науку составляют знания, логически соединенные в систему и проникнутые идеею.

М.Куторга



Профессор С. Н. Андриянов

Для понимания цели, которая преследуется в этой статье, можно начать с небольшого обзора состояния дел в проблеме моделирования сложных динамических систем. Построим наши рассуждения на примере моделирования физических процессов и явлений. Хотя конечные цели большинства исследователей, занимающихся моделированием, довольно близки и состоят, прежде всего, в том, чтобы усовершенствовать понимание основных физических явлений и процессов, объекты, в терминах которых они работают, весьма различны. Более того, взаимодействие этих объектов, их состав и количество также существенно различаются и часто зависят не столько от квалификации исследователя, сколько от его вкуса и пристрастий. Однако хочется думать, что существуют некоторые общие, объективные характеристики процесса моделирования, которые могли бы послужить отправной точкой в любых исследованиях, независимо от того, какая конкретная задача рассматривается. В широкой печати одна из самых первых публикаций на данную тему принадлежит академику А.А.Самарскому. Он ввел понятие триады *модель-алгоритм-программа* и рассмотрел взаимодействие ее компонент с учетом использования компьютерной техники и реализации результатов на практике. Только разумное сочетание всех этапов моделирования может привести к успеху с минимальными потерями. Одним из подтверждений важности проблемы моделирования в научных исследованиях является формирование нового раздела математической физики - вычислительной физики. Эта наука построена на трех китах: во-первых, на физических законах, принципах, экспериментальных данных; во-вторых, на фундаментальной и прикладной математике и, наконец, на современных достижениях компьютерных технологий. Естественно, что взаимодействие этих трех составных частей подчиняется своим законам, которые во многом еще предстоит открыть. Можно сформулировать следующее определение процесса моделирования.

Под процессом моделирования будем понимать построение некоторой совокупности объектов физической, математической и компьютерной природы, взаимодействие которых должно обеспечивать эффективное решение поставленных задач.

В последние годы появились работы, в которых сам процесс моделирования становится объектом исследования. Иными словами, делаются попытки построить теорию моделирования, с тем, чтобы сформулировать основные законы, по которым надо строить оптимальную стратегию моделирования, выработать критерии, по которым осуществляется оценка эффективности взаимодействия указанных трех составных частей процесса моделирования.

Основной целью любого моделирования является проверка идей, гипотез, получение экспериментальной информации, которые позволяют прогнозировать поведение исследуемого объекта при тех или иных условиях. Развитие вычислительной техники и соответствующего программного обеспечения привели к возможности построения виртуальных моделей, максимально приближенных к реальным объектам. В свою очередь, развитие идеологии процесса моделирования способствует созданию, как новых архитектур вычислительных систем, так и новых парадигм в программировании. В современной науке исследование эволюции любых процессов и явлений практически невозможно представить без применения компьютерной техники. Это объясняется, прежде всего, сложностью современных задач, объемом информации, которую необходимо переработать для получения конечного результата. Именно включение в процесс моделирования компьютерных технологий позволило подойти вплотную к решению многих задач естествознания, о которых еще недавно и не помышляли. Попытки оптимизировать путь к получению желаемых результатов с необходимостью привел к осмыслению самой концепции моделирования.

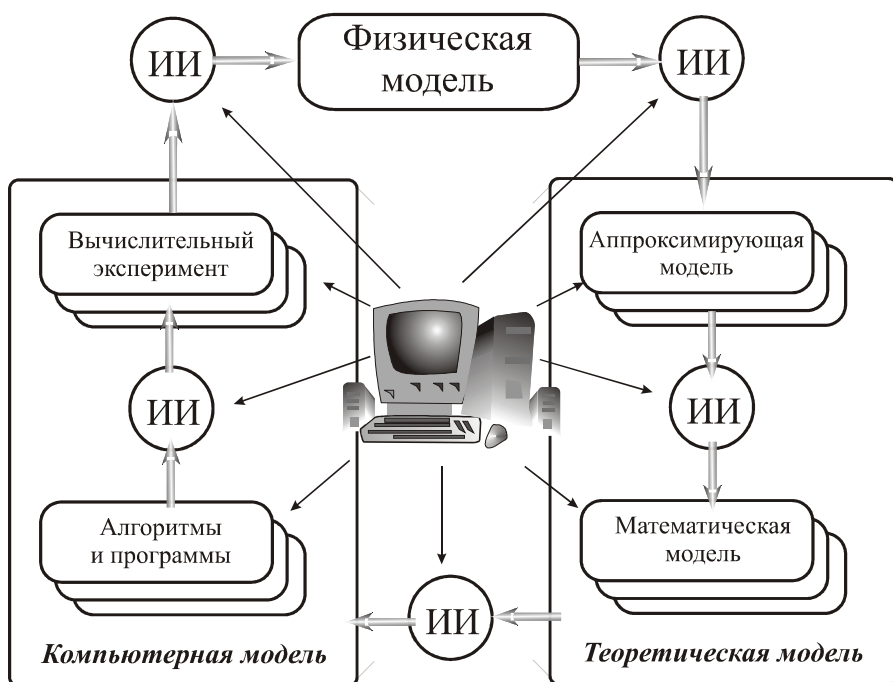
Для пояснения некоторых основных положений обсуждаемого подхода к этой проблеме приведем гра-

фическую схему, иллюстрирующую процесс построения иерархических моделей различного уровня.

Под *физической моделью* объекта (процесса, явления) понимается по возможности полное (на данный момент) его описание в физически содержательных терминах и понятиях. В физическую модель без всяких изменений и упрощений должна входить вся теоретическая (в виде функциональных, дифференциальных и прочих связей и соотношений) информация и все экспериментальные данные, изложение гипотез, которые могут быть сформулированы по поводу еще не изученных явлений и соотношений между различными частями исследуемого объекта. Таким образом, физическая модель представляет собой содержательное отображение реального объекта на уровне современных знаний. Особые трудности возникают при создании физических моделей систем управления. Дело в том, что в этом случае приходится строить единую систему описания модели процессов, имеющих различную качественную природу (различие в природе управляемого объекта и управляющего субъекта особенно проявляется в задачах управления квантово-механическими процессами, ансамблями частиц и тому подобным). Кроме того, модели процессов управления должны включать физические критерии качества, определяющие предназначение, эффективность и качество функционирования системы управления. При математической формализации необходимо учитывать не только приближенный характер экспериментальных данных и ограниченные возможности в измерении (наблюдении) состояния системы управления, но и проблемы физической реализуемости «рассчитанных» оптимальных управляющих воздействий. Особую трудность вызывают задачи управления системами с распределенными параметрами.

Следующим этапом моделирования является построение *аппроксимирующей модели*. Введение в рассмотрение этого промежуточного этапа между физической и математической моделями позволяет по-иному взглянуть на весь процесс моделирования исследуемых процессов и явлений. Аппроксимирующая модель,

так же как и физическая, описывает объект или процесс в физически содержательных терминах. Но в отличие от физической модели при построении аппроксимирующей модели отбрасываются факты, не оказывающие заметного влияния (в пределах некоторой точности) при заданных условиях на ход процесса или поведение объекта. При переходе от физической модели к аппроксимирующей модели сложные математические зависимости и соотношения заменяются по возможности более простыми, аппроксимирующими соотношениями. В частности, одни классы функций заменяются другими, более простыми, нелинейные соотношения – линейными (с помощью процедуры линеаризации) и так далее. При наличии недостаточно изученных явлений и связей в аппроксимирующей модели могут вводиться аппроксимирующие





гипотезы. При этом целесообразно строить последовательности иерархически вложенных аппроксимирующих моделей, каждая из которых имеет свои границы применимости (по принципу «от более простого к более сложному»). Большое значение имеет принцип минимальной сложности аппроксимирующей модели исследуемого процесса или объекта. При всех упрощениях и отбрасывании различных несущественных (на данном этапе) факторов или малых параметров необходимо дать оценку границ применимости полученной модели. Дело в том, что малые параметры могут оказать громадное влияние на устойчивость и качественное поведение исследуемой динамической системы.

Построение аппроксимирующих моделей – весьма сложная задача. Именно на этом этапе огромную роль играют методы и средства *искусственного интеллекта* (ИИ), в частности методы и средства *компьютерной алгебры* (*символьной математики*). Последние позволяют резко повысить эффективность построения аппроксимирующей модели и существенно снизить порядок (практически свести к нулю) ошибок, которые являются «проклятием» чрезвычайно громоздких математических выкладок, сопровождающих процесс построения аппроксимирующих моделей. Использование в процессе моделирования методов и средств искусственного интеллекта, с нашей точки зрения, является обязательным. Это открывает перед исследователями совершенно новые возможности на пути исследования сложных процессов и явлений. Кроме сказанного, следует указать на чрезвычайно важную часть процесса формирования аппроксимирующей модели – этап физической формализации задачи. Под этим понимается процесс декомпозиции исходной задачи, построения системы подмоделей – элементарных моделей, из которых и строится та или иная аппроксимирующая модель. Система элементарных моделей, объединенная в единое целое иерархической системой ориентированных графов, является базовой для перехода к следующему этапу процесса моделирования – построению *математической модели*.

На третьем этапе строится *математическая модель* объекта или процесса. Под математической моделью понимается система уравнений и соотношений, входящих в аппроксимирующую модель, четкая математическая формализация всех соотношений, условий и ограничений. При этом обычно осуществляется дальнейшее абстрагирование модели (в частности, переход к безразмерным величинам, уже не имеющим непосредственной физической интерпретации). Кроме того, математическая модель включает в себя методы решения поставленных на этом этапе математических задач в виде уравнений самой различной природы, задач синтеза систем (в том числе оптимального) управления и тому подобного. Однако на этом этапе необходимо проводить согласование точности задания и наблюдения данных (определяемой классом точности используемых приборов и инструментов) и точности решения задач. По возможности используемые методы должны быть универсальны (по крайней мере, для данного класса задач), но не в ущерб их эффективности, что обычно связано со специализацией применяемых методов. На этом этапе формулировки математической модели также могут использоваться методы компьютерной алгебры с целью проведения необходимых преобразований для

построения аппроксимирующих сумм, произведений, вычисления интегралов, производных, решения (если это возможно) в символьном виде уравнений, построения разностных схем (особенно это касается уравнений в частных производных). Очевидно, что для каждой аппроксимирующей модели, вообще говоря, строится некоторая последовательность (в том числе и иерархическая) математических моделей.

Следуя далее по схеме, мы переходим к реализации математической модели в виде *алгоритмов* и *программ* (пакетов прикладных программ). На этом этапе использование средств и кодов компьютерной алгебры (например, таких популярных систем, как Mathematica, Maple) позволяет автоматизировать процесс кодирования компьютерных программ, снижая тем самым как временные затраты, так и число совершаемых при таких объемах преобразований ошибок.

Обычно в естественнонаучных исследованиях пакеты прикладных программ используются для проведения, прежде всего, численных расчетов с целью проверки адекватности выбранных аппроксимирующих и соответствующих математических моделей (в частности, такие пакеты, как MatLab, MatCad). При этом основную функциональную нагрузку при экспертизе получаемых результатов несет исследователь. Очевидно, что требования, предъявляемые к такого рода экспертам, весьма высоки. Сочетание знаний в предметной области, в математических методах и программном обеспечении для одного человека весьма проблематично из-за чрезвычайной сложности современных задач. Поэтому в настоящее время на арену научных и технических расчетов все шире привлекаются методы и средства *искусственного интеллекта*, которые реализуются в виде создаваемых в основном пока прототипов *экспертных систем*. Заметим, что частным случаем такого рода систем являются так называемые *электронные учебники*, позволяющие неопытному исследователю («студенту») в интерактивном режиме получать новые знания и приобретать опыт в исследовании интересующих его процессов и объектов. Во многих современных работах большое внимание уделяется концептуальным вопросам построения интеллектуальных систем. Несмотря на громадные успехи в области численного моделирования (прежде всего с применением вычислительной техники), потребность в создании новых подходов к самому процессу моделирования постоянно растет. Дело в том, что традиционные алгоритмы и методы их реализации не дают возможности гибко переходить от одной модели системы к другой в процессе вычислительного эксперимента, тем самым снижая эффективность процесса исследования. Второй аспект любого вычислительного эксперимента связан, прежде всего, с взаимодействием человека и машины. Интеллектуальный интерфейс, использующий естественный для данного класса исследуемых систем язык, снабженный так называемой графической оболочкой с системой help-файлов и интерактивным учебником, в настоящее время является необходимой составной частью любой претендующей на признание программы (пакета программ). В качестве примера подобных систем в области научного моделирования можно упомянуть такие программы (коды), как MatCad, MatLab, Mathematica, Maple и тому подобные. Эти пакеты являются универсальными кодами, предназ-

наченными, прежде всего, для работы с уже сформированными математическими моделями, и не позволяют использовать их на предварительном этапе формирования исследуемой системы (этапе проектирования). Кроме того, универсальность (направленность на решение задач самого широкого класса) снижает эффективность их применения для конкретных, обладающих своими специальными свойствами классов задач. Следует сказать и о структуре таких кодов: некоторое множество математических методов (достаточно эффективных), разнородных по природе объектов и операций над ними, погружается в графическую оболочку для обеспечения гибкой манипуляции этими методами. Однако разнородность как объектов, так и операций не позволяет создавать эффективные (с вычислительной точки зрения) компьютерные модели реальных достаточно сложных динамических систем. Действительно, только при обеспечении простоты структуры запоминаемой информации существенно упрощаются процессы ее получения, обработки, хранения и извлечения из баз данных (знаний) для внедрения в вычислительный эксперимент. В связи с вышесказанным можно утверждать, что проблема автоматизации научных исследований является чрезвычайно актуальной, тем более что развитие вычислительной техники (hardware) и программного обеспечения (software) позволяет резко повысить эффективность (в широком смысле этого слова) вычислительного эксперимента. В современной литературе термин *вычислительный эксперимент* часто заменяется термином *компьютинг*. Наконец, получаемые в процессе проведения вычислительного эксперимента (вернее, серии такого рода экспериментов) результаты проходят фазу интерпретации (возвращения в область физически содержательных объектов) и проверки на адекватность как с выбранной аппроксимирующей моделью, так и с исходной физической моделью. При обнаружении адекватности полученных результатов данным, соответствующим выбранной аппроксимирующей модели, мы либо заканчиваем процесс исследования, либо переходим к более сложной аппроксимирующей модели, если сопоставление результатов вычислений с данными физической модели показывают их недостаточность или несостоятельность. В последнем случае используемый подход должен обеспечивать оперативный выбор другой аппроксимирующей модели без разрушения самой структуры вычислительного процесса и с максимальным использованием полученных ранее результатов (принцип наследования).

Вообще говоря, интерпретация результатов (в терминах соответствующих моделей) возможна и на более ранних этапах моделирования, например при построении аппроксимирующей модели, выборе той или иной математической модели для аппроксимирующей модели. Здесь также весьма эффективны методы компьютерной алгебры, так как они позволяют получать аналитические соотношения в виде решений уравнений, симметрий (как непрерывных, так и дискретных), инвариантов и тому подобного. Именно символическая форма такого рода представления позволяет оперативно, еще на этапе выбора аппроксимирующей и математической моделей, осуществлять поиск более подходящих моделей. В частности, обычно задачи синтеза систем управления конкретизируются на этапе согла-

сования аппроксимирующей и математической моделей. Поиск же оптимального управления в синтезированном классе управлений осуществляется уже на этапе вычислительного эксперимента.

Необходимо отметить, что описанная структура процесса моделирования является не просто графической интерпретацией этого процесса, а новым подходом к моделированию, который наиболее полно реализуется в парадигме *динамического моделирования*. В основе этой парадигмы лежит принцип объектности на всех этапах моделирования, возможности внедрения и извлечения тех или иных объектов по мере необходимости. Однако применение этой идеологии требует не просто по-иному взглянуть на этап построения компьютерной модели, а практически перестройки всей идеологии проведения процесса моделирования. Прежде всего необходимо ввести как обязательное требование адекватности математической модели не только аппроксимирующей модели (обычно воспринимаемой как физическая модель), но и современному аппаратному и программному обеспечению. Следует отметить, что данный подход предполагает не только строго формализованный математический инструментарий, но и средства широкого использования физической интуиции исследователя, что обычно связано с визуализацией результатов компьютеринга. Очевидно, что эффективность такого рода визуализации существенно зависит от скорости обработки информации, которая, в свою очередь, во многом определяется не столько быстродействием вычислительных средств, сколько эффективностью идеологии моделирования и используемых математических методов. Более того, можно сформулировать *принцип сквозной адекватности* математической модели. Под сквозной адекватностью математической модели понимается ее адекватность не только аппроксимирующей модели, но и компьютерной модели, то есть аппаратному и программному обеспечению.

Что же имеется в виду под адекватностью математической модели компьютерной модели? На настоящий момент широко используются вычислительные системы с распараллеливанием и распределением вычислительного эксперимента. В то же время наблюдается интенсивное развитие технологий программирования (имеется в виду, прежде всего, объектно-ориентированное программирование, развитие методов и средств искусственного интеллекта). Их использование дает возможность создавать не просто «читающие программы», а такие программы, которые в процессе взаимодействия с человеком позволяют не только получать новые качественные результаты, но и самообучаться и тем самым на определенном этапе выступать в качестве машинного эксперта. Иными словами, речь идет об интеллектуализации вычислительного эксперимента. Таким образом, если математический аппарат позволяет в максимальной степени использовать указанные достижения, то эффективность проведения вычислительного эксперимента существенно повысится.

Заметим, что большинство подходов, реализуемых при решении самых различных задач, основано на достаточно традиционных математических методах. Основная проблема в процессе интеллектуализации вычислительного эксперимента заключается в отсутствии унифицированного описания различных составных частей исследуемого объекта или процесса, что,



естественно, резко снижает возможности проведения процесса интеллектуализации. В качестве информационной базы можно предложить объектно-ориентированный формализм, распространенный на все этапы моделирования. Подобный подход впервые был предложен классиком объектно-ориентированного программирования Гради Бучем. Как естественное развитие его идей явилось создание различных программных средств и языков моделирования, например, CASE (Computer Aided Software Engineering)-средств, языка UML (Unified Modeling Language) и тому подобных. Следует отметить, что основное предназначение CASE-средств – проектирование больших и сложных систем, прежде всего бизнес-систем. Однако в научных исследованиях эти средства пока не нашли своего применения, хотя возможности разработанных программных инструментов чрезвычайно велики.

В заключение следует сказать, что всем описанным выше сторонам процессов теоретического и компьютерного моделирования на факультете прикладной

математики–процессов управления уделяется много внимания. При этом область применения многих из описанных идей простирается от задач самых различных областей физики до задач экономического и меконико-биологического характера. Политика развития факультетской компьютерной сети направлена как на проведение научных исследований, так и на повышение интенсификации учебного процесса. При этом обеспечивается более активное привлечение студентов и аспирантов к научным исследованиям в рамках различных грантов (в том числе и зарубежных) и договорных работ, проводимых в НИИ вычислительной математики и процессов управления им. В.И.Зубова.

С.Н.АНДРИАНОВ, профессор, заведующий кафедрой компьютерного моделирования и многопроцессорных систем факультета ПМ-ПУ СПбГУ

Олимпиада по информатике на факультете ПМ-ПУ

