ISSN № 9125 0912. ВІСНИК ДНУ. Серія "Моделювання". № 8. 2009. Вип. 1. С. 3–17

УДК 519.6

АНАЛИЗ ТЕНДЕНЦИЙ РАЗВИТИЯ СОВРЕМЕННОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО И ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Д. В. Евдокимов, А. А. Кочубей, Н. В. Поляков
Днепропетровский национальный университет им. Олеся Гончара, Днепропетровск 49050. E-mail: devd@mail.ru

Рассмотрены некоторые последние тенденции развития математического и численного моделирования, обусловленные как совершенствованием математических моделей и алгоритмов численного решения, так и беспрецедентным ростом производительности электронно-вычислительной техники. Показано, что изучение свойств численных алгоритмов целесообразно проводить на специальных тестовых примерах, имеющих аналитическое решение.

Ключевые слова. Математическая модель, численный метод, численная модель.

1. Введение

На протяжении последних нескольких десятилетий наблюдается беспрецедентный устойчивый рост интереса к математическому и численному моделированию, стимулируемый не менее беспрецедентным ростом возможностей вычислительной техники и ее повсеместным распространением. Во многих областях науки, техники и технологии рассматриваемые подходы стали доминирующими в научных исследованиях, а также при проектировании новых технологических процессов и оборудования. Кроме того, управление производственными процессами все чаще осуществляется на основе математических и численных моделей. И даже в тех областях, где указанные подходы еще не столь популярны, например, в гуманитарных науках, прослеживается явная тенденция к математизации подходов. Как результат роста популярности математического и численного моделирования существенно возросли и требования, предъявляемые к точности и эффективности расчета. Очевидно, что одним из путей повышения точности и эффективности прикладных расчетов является совершенствование применяемых математических моделей, однако этот путь связан, прежде всего, с развитием предметных областей, к которым относятся данные математические модели, модификация же самих моделей хотя и может дать существенный вычислительный эффект при использовании со специализированными алгоритмами, но применима в очень ограниченном числе случаев. Другим, не менее очевидным, путем совершенствования методики прикладных расчетов является развитие вычислительных алгоритмов. В этом направлении в последние десятилетия был достигнут существенный прогресс, выразившийся в появлении значительного числа как универсальных, так и специализированных алгоритмов. В настоящее время число применяемых алгоритмов уже столь велико, что внутри численных методов возникла явно выраженная специализация, которая продолжает углубляться. В этой ситуации достаточно остро встал вопрос о "критериях качества" математических моделей, вычислительных алгоритмов и, в конечном итоге, проведенных расчетов. Как будет показано ниже, традиционные "критерии качества" уже не отвечают современным требованиям. Данная работа посвящена развитию методик оценки качества расчетных схем на основе численного эксперимента.

2. Выбор объекта исследования

Большое разнообразие вычислительных задач, возникающих в приложениях, значительные различия в их физической и математической сущности и, как следствие, громадное разнообразие алгоритмов решения этих задач делают практически невозможным рассмотрение универсальных критериев оценки их решений. Поясним эту мысль: до сих пор во многих областях естествознания уровень математических моделей таков, что актуальными являются оценочные расчеты, отражающие только качественную картину моделируемого процесса, в то же время численное моделирование в других областях, например, в ряде разделов механики сплошной среды, достигло предела точности вычислений компьютера. Во многих случаях остается принципиально неясным характер нелинейностей, определяющих структуру решения задачи, не всегда удается корректно учесть малые воздействия на исследуемые системы. Наконец, зачастую приходится моделировать явления, физическая природа, а, следовательно, и математические модели которых не совсем ясны, например, турбулентность.

3. Современное состояние вопроса

Количество публикаций, посвященных применению методов математического и численного моделирования в различных областях науки и техники, исчисляется десятками, если не сотнями тысяч, и, безусловно, столь велико, что не оставляет авторам настоящей работы ни малейшей надежды проследить какие-либо тенденции по публикациям. Личные научные интересы авторов касаются, в первую очередь, численных методов гидродинамики и тепломассообмена, но даже в этой, намного меньшей области, где нет столь существенных различий в уровне работ, проследить тенденции по публикациям чрезвычайно трудно, хотя такие попытки делались в обширных и достаточно фундаментальных монографиях [1, 6, 8, 9], оказавших заметное влияние на развитие указанной области. Таким образом, индуктивный подход к анализу — от частных тенденций к общим — в данном случае настолько затруднен, что применение его представляется нецелесообразным. Альтернативный дедуктивный подход к рассматриваемой проблеме не столь очевиден, но только он дает возможность проследить закономерности современного этапа развития математического и численного моделирования. Традиционно дедуктивный подход связывают с математическими методами исследования, поэтому применение его в рассматриваемой области представляется вполне естественным. Однако, как правило, дедуктивный подход используют для анализа свойств определенной модели или алгоритма, в данной же работе предлагается применить его для анализа тенденций развития области.

Исторически вопрос об эффективности, или в более глобальной формулировке, о "качестве"алгоритма возник довольно давно, еще в начале эры машинных вычислений, и в течение достаточно долгого времени был ключевым вопросом вычислительной математики, поскольку для маломощных компьютеров того времени неэффективные алгоритмы были неприемлемы вообще. Следует отметить, что первые достаточно простые численные алгоритмы были тщательно исследованы как теоретически, так и путем численного эксперимента. К сожалению, в дальнейшем сложность вычислительных алгоритмов возрастала намного быстрее, чем развивались возможности их теоретического анализа, поэтому теоретические оценки эффективности алгоритмов в значительной мере утратили свое значение.

Поясним эту ситуацию. Для большинства алгоритмов, даже достаточно сложных, относительно легко получить оценку количества арифметических операций, используемых при расчете. Однако количество арифметических операций определяет скорость счета, а для получения оценки эффективности необходимо оценить еще и погрешность вычислений, именно в этом вопросе и возникли наибольшие трудности. Дело в том, что порядок аппроксимации, который представляется очевидной количественной мерой "близости" дискретной (расчетной) и непрерывной моделей, не является единственным фактором, определяющим погрешность расчета, на точность вычислений влияют также скорость сходимости, многочисленные и трудноучитываемые погрешности, вносимые на разных этапах алгоритма, и их взаимодействие, устойчивость расчетной схемы. Перечисленные факторы плохо поддаются теоретическому учету, особенно для сложных алгоритмов. Кроме того, погрешность практического расчета существенно зависит от программной реализации алгоритма, что составляет отдельную и очень существенную проблему как для численного моделирования, так и для вычислительной математики в целом.

Таким образом, возникла тенденция разделять теоретические оценки алгоритма и его экспериментальные исследования, относя вопрос об эффективности алгоритма преимущественно к последним. Наиболее полно и последовательно эта точка зрения была сформулирована в книге Д. Ван Тассела [5], где вопрос об эффективности алгоритма был рассмотрен как часть общей проблемы эффективности программного обеспечения. Этот подход принципиально отличался от классического теоретического подхода, доминировавшего в то время, поскольку он утверждал невозможность никакой другой реализации алгоритма кроме как в программном обеспечении и сводил эффективность алгоритма к составной части эффективности программного кода. Точка зрения Д. Ван Тассела отражала, прежде всего, опыт большого числа практикующих программистов и не была принята большинством математиков, работающих в области численных методов. Однако именно эта точка зрения предлагала простой и понятный выход из кризисной ситуации, вызванной усложнением расчетных алгоритмов. Методики тестирования программного обеспечения, о которых писал Д. Ван Тассел, достаточно просты и очевидны, поэтому идея тестирования программ с целью определения эффективности алгоритма приобрела большую популярность в среде программистов. Справедливости ради следует отметить, что эффективность программы зависит не только от эффективности алгоритма, но и от "качества" программной реализации, то есть, эффективности применяемых автором программы тех или иных приемов программирования. Уже во времена Д. Ван Тассела были известны многочисленные примеры, когда незначительные чисто программные усовершенствования, не затрагивающие алгоритм, приводили к резкому сокращению времени счета или значительному повышению точности расчета. Это и было основным возражением против подхода Д. Ван Тассела. Дискуссия о роли численного эксперимента на тестовых задачах для оценки "качества" алгоритмов, математических и численных моделей продолжается до сих пор, и вопрос о корректности такого подхода еще весьма далек от окончательного разрешения.

Вторым поворотным моментом в эволюции взглядов на методы исследования алгоритмов стал выход книги [3], в которой был рассмотрен вопрос об использовании в вычислительной практике алгоритмов, основанных на расходящихся разложениях в ряды, или алгоритмов, о сходимости которых ничего не известно. Основываясь на достаточно широкой и успешной практике прикладных инженерных и научных расчетов, авторы книги [3] сделали вывод о целесообразности использования таких алгоритмов в целом ряде случаев, когда результаты расчетов могут быть удостоверены тем или иным путем. Таким образом, в книге [3] вопрос вновь свелся к методам тестирования алгоритма.

Впоследствии было множество публикаций, посвященных эффективности численных алгоритмов, верификации результатов расчетов, тестированию алгоритмов и программ и, конечно, теоретическому анализу алгоритмов. Более того, практически в каждой работе, посвященной математическому и численному моделированию, эти вопросы затрагиваются в той или иной мере. Не имея возможности охватить в данном кратком обзоре всю массу упомянутых публикаций, сошлемся на монографии [2, 13, 14, 15], в которых рассматриваемые проблемы анализируются более подробно, но, в целом, следует отметить, что принципиального прогресса в данном направлении после выхода книг [3, 5] не наблюдалось, хотя были предложены отдельные высокоэффективные приемы и методики, а ряд других подходов получил существенное развитие.

4. Нерешенные задачи и цели настоящей работы

Как отмечалось выше, достаточно полный и последовательный анализ литературы, посвященной проблеме эффективности вычислительных алгоритмов, в рамках данной работы практически невозможен. Поэтому ограничимся анализом общих тенденций, проявившихся в вычислительной математике в последнее время. Как можно заключить из вышеизложенного, ситуация в вопросе об эффективности вычислительных алгоритмов запутана и противоречива. Существенным фактором, влияющим на рассматриваемую область, является стремительный рост возможностей вычислительной техники. Согласно закону Мура производительность вычислительных систем удваивается каждые 18 месяцев, а рост возможностей соответствующих пакетов прикладных программ происходит еще быстрее вследствие совершенствования алгоритмов, в них используемых. Благодаря столь быстрому росту возникло даже мнение о том, что в настоящее время проблема эффективности вычислительных алгоритмов не является достаточно актуальной.

Покажем ошибочность этой точки зрения. Согласно закону Мура производительность вычислительной техники за последние 15 лет выросла примерно в 1000 раз. Это означает, что в наиболее сложных из существующих вычислительных задач — пространственных задачах — можно увеличить количество узлов сетки в 10 раз, то есть на порядок (если 15 лет назад в расчетах на персональном компьютере "хорошей"считалась сетка 50 50 50, а на более мощных системах от 150 150 150 до 200 200 200, то сейчас — данные взяты на середину 2008 года — сетка 500 500 500 вполне достижима на мощном персональном компьютере, а на системах большей мощности могут использоваться сетки от 1000 1000 1000 до 2000 2000 2000). Понятно, что в задачах, решавшихся 15 и более лет назад, это увеличение вычислительных возможностей позволило достигнуть буквально поразительного прогресса. Так сетки, применявшиеся 15 лет назад, позволяли более или менее точно рассчитывать эффекты геометрического масштаба порядка 0,1 размера области решения, а сетки, применяемые сейчас, предоставляют аналогичную возможность для эффектов масштаба 0,01—0,005 размера области. Но за те же 15 лет появились принципиально новые задачи, связанные с развитием микроэлектроники, микромеханики, микробиологии и, наконец, нанотехнологий, для которых соотношение характерного размера исследуемых эффектов к характерному размеру области на несколько порядков меньше, чем легко достижимые сейчас масштабы 0,01—0,005.

Таким образом, с появлением новых задач требования к производительности вычислительной техники только возросли, причем достаточно существенно, а вывод о том, что возможности вычислительной техники практически полностью удовлетворяют потребности в расчетах или близки к тому, следует признать опасной иллюзией. Причинами данного весьма распространенного заблуждения являются: значительный прогресс в классических технических задачах, сформулированных в 50–60-е годы прошлого века, а то и ранее; не исчерпание, но значительное уменьшение списка нерешенных задач математического и численного моделирования; быстрый рост инсталляционной базы вычислительной техники, сделавший ее очень доступной для проведения массовых расчетов; прогресс программного обеспечения, исключительная простота и легкость работы с ним по сравнению с тем, что было 15 и более лет назад.

Приведенные выше соображения показывают, что проблема эффективности численных методов, равно как и общая проблема эффективности математического и численного моделирования, еще весьма далеки от своего полного разрешения, несмотря на значительный прогресс, достигнутый в этой области. Более того, проблема эта продолжает оставаться весьма актуальной. Конечно, в настоящее время несколько изменилось понятие эффективности— если 15 и более лет назад под эффективностью алгоритма понималось, прежде всего, минимальное время счета при сколько-нибудь приемлемой точности, то сейчас под эффективностью подразумевают корректность и высокую точность результатов, а вопрос времени уже не столь важен.

На заре развития вычислительной техники и численных методов потребности практики во многом сводили проблему эффективности численного моделирования к обеспечению адекватности расчета, то есть сравнению результатов численного расчета с результатами эксперимента. Важной тенденцией в развитии математического и численного моделирования уже на протяжении достаточно длительного времени является изучение явлений, экспериментальное исследование которых невозможно в силу тех или иных причин. Именно это обстоятельство обусловило поиск критерия адекватности численного решения, не связанного с физическим экспериментом. Следует отметить, что прогресс в данном направлении в настоящее время оставляет желать много большего. Хотелось бы отметить еще одну тенденцию: прогресс методов численного моделирования в последние десятилетия шел намного быстрее прогресса методов экспериментальных исследований, в результате чего в разные моменты времени, но к настоящему времени уже в подавляющем большинстве направлений науки и техники точность численного расчета превысила точность экспериментального исследования. Более того, сейчас типичной следует считать ситуацию, когда погрешность численного расчета может быть на несколько порядков меньшей, нежели погрешность соответствующего натурного или лабораторного эксперимента. В силу высказанных соображений использование экспериментальных данных для контроля точности численных расчетов представляется нелепым, в какой-то степени последние можно использовать лишь для оценки адекватности численного результата, да и то с известными оговорками.

Вышеперечисленные трудности, противоречия и проблемы стимулировали написание настоящей статьи, очевидной целью которой является выделение перспективных направлений развития математического и численного моделирования с учетом перечисленных выше неоднозначных тенденций развития таковых. Впервые авторы обратились к этим вопросам в работе [12], естественным логическим продолжением которой является настоящая статья.

5. Проблемы адекватности, точности и эффективности результатов численного моделирования

Рассмотрим традиционную схему математического и численного моделирования: "физическое явление — физическая модель — математическая модель — численный метод — численная модель — результаты численных расчетов" (справедливости ради следует отметить, что, как правило, эта схема в литературе приводится в усеченном виде, но приведенный вариант выделяет ряд особенностей, важных для анализа погрешностей). В литературе основное внимание при анализе приведенной логической схемы по непонятным причинам уделяется вопросам неединственности физических и, соответственно, математических моделей явлений и взаимоотношений между альтернативными моделями. Не умаляя методологического и общефилософского значения указанной проблемы, авторы настоящей статьи отнюдь не считают ее ключевой для развития математического и численного моделирования.

По мнению авторов, перманентные требования повышения точности расчетов, возникающие в современных научных исследованиях и при разработке новых технологий, делают ключевой проблему возникновения и накопления погрешности в рамках указанной схемы. Именно поэтому проведено разграничение этапов "математическая модель — численный метод — численная модель — результаты численных расчетов", ведь каждый из этих этапов исследования вносит в решение специфическую погрешность. Прежде чем рассматривать генерацию погрешности в указанной схеме, следует разрешить следующее классификационное противоречие: в схему расчета неизбежно входят полученные эмпирическим путем параметры и зависимости, отражающие свойства среды (физические, химические, геометрические и прочие), в которой происходит исследуемый процесс. Забегая вперед, укажем, что зачастую на современном этапе именно эти зависимости оказываются наиболее существенным источником погрешности, поскольку, как отмечалось выше, погрешности экспериментальных методов оказываются достаточно большими (а иногда и недопустимо большими) по сравнению с погрешностями, вносимыми на других этапах исследования.

Авторы настоящей работы считают правильным отнести определение упомянутых параметров и формирование указанных эмпирических зависимостей к этапу формирования физической модели явления, а не к математической модели, как это иногда делается. Приведенная классификация, однако, не снимает остроты возникшей проблемы [12]: общие математические модели отдельных классов физических явлений, в которых физические свойства среды отражены в виде формальных параметров, намного точнее, чем математические модели индивидуальных физических явлений из этих классов, включающих экспериментально определенные параметры и зависимости. Отметим, что аналитические решения строятся, как правило, для общих математических моделей, физические эксперименты проводятся только для индивидуальных физических явлений, а численные расчеты, вообще говоря, могут быть проведены в обоих случаях.

Таким образом, тезис о том, что точность численного расчета не может превышать точность экспериментальных данных, представляется не всегда правильным. Зачастую при моделировании индивидуальных физических явлений возникает парадоксальная ситуация, когда в математическую модель включают результаты эксперимента, а затем для определения адекватности и точности результатов численного решения их сравнивают с тем же или аналогичным экспериментом. Очевидно, что общая погрешность такого численного результата определяется преимущественно погрешностью физического эксперимента, а любые выводы о точности численного расчета в присутствии куда как более значительной погрешности физического эксперимента представляются весьма сомнительными. То есть, в данном случае речь может идти только об адекватности подхода, но никак не о его точности.

С точки зрения авторов настоящей статьи целесообразно тестирование численных подходов на аналитических решениях. Результаты такого тестирования более информативны, позволяют прямо судить о точности численного подхода, не требуют разделения на погрешность численного решения и общую погрешность численного результата. Таким образом, в схеме "физическое явление— физическая модель— математическая модель— численный метод— численная модель— результаты численных расчетов" удается выделить погрешности, возникающие на всех промежуточных стадиях: погрешность физической модели определяется не только как погрешность, вносимая в результате неизбежного упрощения физических представлений, но и как погрешность экспериментальных данных; погрешность математической модели понимается в традиционном смысле. Если погрешность физической модели, в принципе, может быть оценена, то погрешность математической модели с трудом поддается формализации. Для оценки последней можно рекомендовать лишь сравнительный анализ результатов аналитических решений, конкретизированных для специально подобранных физических экспериментов, с результатами этих экспериментов, что, однако, возможно лишь при наличии достоверных оценок погрешности самих экспериментов. Погрешности численных алгоритмов достаточно хорошо изучены в соответствующей теории, поэтому не будем на них останавливаться подробно, отметим лишь, что обширная вычислительная практика заставляет считать теоретические оценки большинства численных алгоритмов недостаточно точными, особенно для нелинейных задач. При численном решении сложных задач, требующем совместного использования нескольких разноплановых алгоритмов, теоретические оценки точности отсутствуют совсем. С другой стороны, при исследовании точности численного алгоритма путем численного эксперимента (применяя предложенное выше тестирование на специально подобранных аналитических решениях, которые не обязательно должны быть актуальны, то есть, иметь определенный физический смысл) погрешность численного алгоритма подменяется погрешностью численной (компьютерной) модели, которая включает в себя еще и вычислительные погрешности программной реализации. Как отмечалось выше, корректность такого подхода подвергается обоснованным сомнениям на протяжении уже более 30 лет, что, впрочем, не препятствует его популярности. В защиту данного подхода можно высказать несколько аргументов:

1. Погрешность численной модели, определенную в численном эксперименте, никак не следует рассматривать как абсолютную количественную меру погрешности использованного численного алгоритма, а можно использовать только лишь для сравнения точности и эффективности алгоритмов.

2. Численный алгоритм без программной реализации является сложным абстрактным объектом, в большинстве практически важных и сложных случаев почти не поддающимся теоретическому исследованию, то есть альтернативы численному эксперименту фактически нет.

3. Стандартизация и унификация приемов прикладного программирования в настоящее время достигли такого уровня, что не приходится ожидать сколько-нибудь существенных отличий в точности или эффективности расчета в зависимости от программной реализации. Хотя приведенные соображения и не могут служить доказательством корректности обсуждаемого подхода, авторам настоящей работы они кажутся доста-

точно убедительными.

6. Другие проблемы математического и численного моделирования

Наиболее широко известной и наиболее исследуемой в настоящее время является проблема нелинейности математических моделей. Традиционно в математическом моделировании выделяют сильные и слабые нелинейности. Первые могут привести к неединственности решения, появлению неустойчивостей и бифуркаций, а затем и хаотическому поведению исследуемой системы, возникновению разрывов решения. Трудности, связанные с преодолением перечисленных проблем, общеизвестны, поэтому не будем на них останавливаться подробно. Отметим только, что вблизи неустойчивых состояний и точек бифуркации такие системы становятся весьма чувствительны к малым возмущениям, в том числе и к возмущениям, вносимым численным алгоритмом, поэтому в ряде случаев вычислительная проблема сильной нелинейности тесно связана с проблемой корректного учета малых возмущений, которая будет рассмотрена ниже. Однако даже в случае, когда нелинейность не приводит к перечисленным выше явлениям, она все равно существенно удлиняет процедуру расчета, а иногда и снижает его точность.

Другой важной проблемой, часто связанной с проявлением сильной нелинейности, представляются задачи с малым параметром при старшей производной. Такие задачи естественным образом возникают в гидроаэродинамике больших скоростей. Малый параметр при старшей производной приводит к появлению пограничных слоев, то есть тонких зон с большими поперечными градиентами искомых величин. Два основных подхода — адаптивные сетки и сегментация области решения — позволяют успешно преодолевать трудности, связанные с малым параметром при старшей производной, однако оба указанных подхода являются исключительно ресурсоемкими, поэтому в настоящее время прогресс в данном направлении почти полностью связан с ростом возможностей вычислительной техники.

Современные численные подходы не предусматривают для анализа сильных нелинейностей специальных средств. В результате аппроксимации нелинейная задача сводится к линеаризованному или нелинейному дискретному аналогу, обладающему некоторыми специфическими свойствами, и остается только надеяться, что "поведение" дискретного аналога будет соответствовать "поведению" моделируемой системы. Например, в неустойчивом состоянии вблизи точки бифуркации поведение системы определяется малыми, иногда случайными, иногда систематическими физическими возмущениями. Однако возмущения, неизбежно вносимые погрешностью численного решения, могут оказаться сравнимыми по величине или даже большими, нежели физические возмущения, определяющие поведение исследуемой системы, а поскольку погрешность численного решения зачастую имеет систематический характер, то весьма высока вероятность получения недостоверных результатов моделирования поведения неустойчивой системы вблизи точки бифуркации.

В вычислительной гидромеханике и вычислительном тепломассообмене численные алгоритмы, применяемые при решении сильно нелинейных задач, прошли "естественный отбор" , и алгоритмы, дающие неадекватные результаты, были просто отброшены. Расширение спектра сильных нелинейностей в прикладных задачах, происходящее в настоящее время, и сжатые временные рамки большинства исследований не дают возможности проводить "естественный отбор" алгоритмов для других направлений. Поэтому авторами настоящей работы предложен альтернативный подход. Полагая, что для разных численных методов погрешности численного решения являются независимыми и могут трактоваться как случайные величины, авторы утверждают, что, если численные решения сильно нелинейной задачи существенно различными численными методами (например, методами конечных разностей, конечных элементов и граничных элементов) совпадают с точностью до специально выбранной достаточно малой величины, то это существенно повышает степень достоверности таких результатов. В противном случае результаты таких расчетов представляют широкие возможности для анализа и калибровки расчетных схем. Несмотря на кажущуюся очевидность приведенного утверждения, вычислительная практика показывает, что не только не происходит массового дублирования решения нелинейных задач альтернативными численными методами, но даже трудно найти примеры такого подхода в отдельных единичных исследованиях. Причины этой ситуации совершенно очевидны — разработка и поддержание нескольких альтернативных комплексов прикладных программ слишком трудоемки и дорогостоящи. Тем не менее, авторы убеждены, что без широкого применения данного подхода существенного прогресса в вопросах численного решения сильно нелинейных задач достигнуто не будет.

Слабые нелинейности не представляют таких потенциальных угроз для численного анализа, как их сильные аналоги, однако традиционно в вычислительной практике со слабыми нелинейностями связаны неявные и не всегда достаточно корректные линеаризации, проследить влияние которых в сложном вычислительном процессе не представляется возможным. С другой стороны, в большинстве случаев слабые нелинейности связаны с экспериментально определяемыми свойствами среды, то есть, потенциально являются источниками весьма значительной погрешности, вносимой в расчетную схему извне. Поскольку одним из магистральных направлений развития большинства отраслей науки на протяжении последних двух столетий является уточнение экспериментально определяемых характеристик, проблему слабых нелинейностей и особенно связанных с ними обратных задач следует считать фундаментальной проблемой современного математического и численного моделирования. К сожалению, до настоящего времени проблеме слабых нелинейностей должного внимания не уделялось. В вычислительном плане проблема слабых нелинейностей связана с проблемой корректного расчета малых возмущений, о которой будет сказано ниже.

Трудности, возникающие при учете малых возмущений и расчете эффектов, локализованных в пространстве и во времени, представляют собой следующую ключевую проблему развития математического и численного моделирования. Следует отметить, что проблема эта общеизвестна на протяжении практически всей истории математического и численного моделирования, однако особого внимания она не привлекала, поскольку малые возмущения мало влияют на интегральные характеристики исследуемой системы, за исключением нескольких специальных случаев, например, распределенных малых воздействий. Изменению ситуации способствовали три тенденции, проявившиеся в последнее время:

1) резкое ужесточение требований к сложности расчетов, заставляющее учитывать все более малые эффекты;

2) развитие микроэлектроники, микробиологии и микромеханики, а затем и нанотехнологий, для которых малые и локализованные эффекты являются основными объектами исследования;

3) исследования поведения неустойчивых систем вблизи точки бифуркации.

В современном математическом и численном моделировании даже сформировалось отдельное направление, называемое теорией многомасштабных задач (multiscale problems), очевидным образом связанное с рассматриваемой проблемой и являющееся, по некоторым оценкам, наиболее быстроразвивающимся направлением в данной области науки. Выше уже упоминались связи рассматриваемой проблемы с другими проблемами развития математического и численного моделирования. В вычислительном плане основная трудность при расчете малых и локализованных эффектов заключается в том, что численные методы, основанные на дискретизации области решения, — методы конечных разностей и конечных элементов — принципиально не допускают расчета эффектов подсеточного масштаба (масштаба, меньшего, чем размеры разностных ячеек или конечных элементов), а сколько-нибудь приемлемую точность расчета обеспечивают для объектов, как минимум, в пять раз больших характерных размеров дискретизации.

Авторы настоящей работы видят пути разрешения данной проблемы в использовании вычислительной теории потенциала [10, 11, 12], а также в построении специальных асимптотических разложений [4, 7]. Действительно, в [10, 11] показано, что в вычислительной теории потенциала, основанной на интегральных представлениях решений, понятия подсеточного масштаба не возникает вовсе, однако для эффективного решения задач рассматриваемых классов алгоритмы указанной теории нуждаются в дополнительной разработке. То же самое можно сказать и об использовании специальных асимптотических разложений. В случае распределенных малых воздействий, которые, например, имеют место в гидродинамике многофазных сред, в современной теории математического и численного моделирования отдают предпочтение методам гомогенизации. Не оспаривая полезность и эффективность такого подхода, авторы хотели бы отметить большую перспективность прямых численных расчетов, основанных на уже упоминавшихся методах вычислительной теории потенциала [10, 11].

Наконец, к последней из рассмотренных в настоящей работе проблем хотелось бы отнести многочисленные систематические ошибки, которые в современных условиях требуют интенсивного исследования и, если не устранения, то, по крайней мере, значительного уменьшения. К подобным ошибкам следует отнести: излишние упрощения зависимостей, описывающих свойства среды и другие физические параметры (о чем уже говорилось в связи со слабыми нелинейностями), снесение на конечное расстояние граничных условий в бесконечно удаленной точке, что регулярно имеет место при решении внешних задач, схематизацию формы области решения, пренебрежение относительно малыми влияниями удаленных в пространстве и во времени объектов и процессов. Необходимо отметить, что конечной целью всех перечисленных упрощений является облегчение процедуры численного решения, но производятся они на уровне математической модели. Все перечисленные выше источники погрешности носят явно выраженный систематический характер, следовательно, генерируемые ими ошибки имеют тенденцию к накоплению. Как и многие из обсуждавшихся выше, указанные обстоятельства в течение долгого времени считались "несущественными", и только последнее резкое ужесточение требований к точности численных расчетов заставило всерьез обратить на них внимание. По той же причине, несмотря на значительное количество отдельных, разрозненных исследований, упоминания о которых можно найти в книгах [1, 6, 8, 9], данная проблема была впервые сформулирована в общем виде только в работе [12]. В той же работе авторы указали на применение вычислительной теории потенциала как основной путь преодоления рассматриваемых трудностей, однако представляется целесообразным проведение целого ряда теоретических и методологических исследований, в том числе и при помощи численного эксперимента, для определения степени влияния указанных факторов на общую точность результатов численного моделирования и оценки эффективности различных путей преодоления негативных эффектов этого влияния.

Приведенный перечень проблем развития математического и численного моделирования отнюдь не претендует на полноту и универсальность, а призван указать пути развития данной отрасли науки в связи с переходом от "экстенсивного" развития (когда развитие происходит за счет расширения поля применения дисциплины, увеличения числа математических моделей и формулируемых в их рамках задач) к "интенсивному" развитию, предполагающему, в первую очередь, усовершенствование существующих математических моделей и численных методов.

7. Концепция вычислительной модели

Несмотря на сделанный вывод о преобладающем значении совершенствования существующих подходов, дальнейшее развитие математического и численного моделирования, безусловно, невозможно без появления новых математических моделей сложных систем, плохо поддающихся исследованию в настоящее время. Для таких систем существенным фактором являются неясность или незавершенность физической модели, когда некоторые данные и параметры либо оказываются гипотетическими, либо заданы несколькими альтернативными представлениями, либо вообще неизвестны. То есть речь идет о системе, находящейся в стадии научного исследования. В обычных научных исследованиях для уточнения физической модели проводятся наблюдения, натурные и лабораторные эксперименты, но для сложных систем, а особенно систем уникальных, например, земной атмосферы, космических объектов и тому подобных, такой подход оказывается невозможным. Для таких систем можно осуществить искомое уточнение путем решения некоторых обратных задач или сравнивая результаты наблюдений и измерений с предсказанными на основе численных расчетов в рамках альтернативных математических моделей. Понятно, что такая схема исследования выходит за рамки приведенной выше схемы "физическое явление — физическая модель — математическая модель — численный метод — численная модель — результаты численных расчетов". Поэтому авторами настоящей работы предложена концепция вычислительной модели, которая объединяет в себе набор альтернативных математических моделей, соответствующих разным физическим представлениям, программные реализации численных алгоритмов (желательно нескольких) решения прямых и обратных задач, оцифрованные результаты экспериментальных исследований. Вычислительная модель обеспечивает взаимодействие между перечисленными выше элементами с использованием средств искусственного интеллекта, а также обеспечивает интерфейс для внесения данных новых экспериментов и наблюдений. Вычислительная модель должна обеспечивать уточнение физических и математических моделей на основе поступающих данных, то есть обеспечивать развитие системы. Конечно, вычислительная модель намного сложнее, чем распространенные сейчас численные модели, и требует намного больших компьютерных ресурсов, однако вычислительная модель представляется универсальным инструментом автоматизации научного исследования и практически не имеет альтернативы при анализе сложных систем.

8. Выводы

Резкое усиление требований к точности результатов математического и численного моделирования, повсеместное распространение численного моделирования в практике инженерных и научных исследований, появление настоятельной необходимости в моделировании сложных систем существенно изменили парадигму развития математического и численного моделирования. Вывод о переходе к "интенсивному" развитию в современном математическом и численном моделировании уже был сделан выше. Также выше был сделан вывод о необходимости перехода от математического и численного моделирования к вычислительным моделям. В связи с появлением новых целей развития дисциплины необходимо проведение обширных методологических исследований, которые обеспечили бы выработку эффективных критериев определения достоверности результатов математического и численного моделирования. Перечисленные проблемы развития математического и численного моделирования столь тесно связаны между собой, что было бы неверным ожидать успеха в решении одной из этих проблем без общего прогресса в решении остальных.

Важным принципиальным выводом настоящей работы является заключение о превалирующей роли численного эксперимента в развитии не только численных методов, но и математических моделей.

9. Дальнейшее развитие исследований в данном направлении

Среди вопросов, рассмотренных в настоящей статье, не нашли должного отражения проблемы развития численных методов, что, вероятно, станет предметом следующих работ авторов. Не проанализированы также и вопросы, связанные с численной реализацией математических моделей и численных алгоритмов, которые, безусловно, важны для реализации численных моделей, но с этой точки зрения практически не освещены в литературе. Принципиальным последующим моментом развития данного направления, по мнению авторов, станет массовое внедрение численных моделей сначала в инженерно-техническую деятельность, а затем и в другие области деятельности человека. Для этого этапа станет характерным предъявление еще более жестких требований к достоверности результатов моделирования процессов, а также требований к эффективности численного моделирования, что, конечно, потребует дальнейшего развития идей, изложенных в данной работе.

Было бы целесообразно проведение специальных методических исследований и создание общей концепции вычислительной модели с разработкой компьютерного прототипа на примере какого-либо достаточно хорошо изученного раздела механики жидкости или теории тепломассообмена.

Библиографические ссылки

1. *Андерсон Д.* Вычислительная гидромеханика и теплообмен / Д. Андерсон, Дж. Танненхил, Р. Плетчер. — М. : Мир.— 1990, Т. 1.—364 с., Т. 2.— 332 с.
2. *Ахо А.* Построение и анализ вычислительных алгоритмов / А. Ахо, Дж. Хопкрофт, Дж. Ульман. — М. : Мир.— 1979.— 536 с.
3. *Блехман И. И.* Механика и прикладная математика: Логика и особенности приложений математики / И. И. Блехман, А. Д. Мышкис, Я. Г. Пановко. — М. : Наука, 1983.— 328 с.
4. *Бразалук Ю. В.* Совместное применение метода малого параметра и метода граничных элементов для численного решения эллиптических задач с малыми возмущениями / Ю. В. Бразалук, Д. В. Евдокимов, Н. В. Поляков // Вестник ХНУ. — 2005. — № 703. — С. 50–66.
5. *Ван Тассел Д.* Стиль, разработка, эффективность, отладка и испытание программ / Д. Ван Тассел. — М. : Мир.— 1985.— 332 с.
6. *В*ычислительные методы в динамике жидкостей. — М. : Мир, 1991, Т. 1.— 504 с.,Т. 2.—552 с.
7. *Евдокимов Д. В.* Расчет стационарных температурных полей в областях с малыми возмущениями границы / Д. В. Евдокимов, Н. В. Поляков, Т. И. Тарасова // Диференціальні рівняння та їх застосування, Д. : ДНУ. — 2006. — С. 167–176.
8. *Оран Э.* Численное моделирование реагирующих потоков / Э. Оран, Дж. Борис. — М. : Мир.— 1990.— 660 с.
9. *Пейре Р.* Вычислительные методы в задачах механики жидкости / Р. Пейре, Т. Д. Тейлор. — Л. : Гидрометеоиздат.— 1986.— 352 с.
10. *Поляков Н. В.* Вычислительная теория потенциала. Современное состояние и перспективы использования в механике сплошной среды / Н. В. Поляков, Д. В. Евдокимов // Вестник ДНУ, Сер. Механика. — 2006. — Ч. 1, № 2/1. — С. 7–25.
11. *Поляков Н. В.* Вычислительная теория потенциала. Современное состояние и перспективы использования в механике сплошной среды / Н. В. Поляков, Д. В. Евдокимов // Вестник ДНУ, Сер.Механика. — 2006. — Ч. 2, № 2/1. — С. 25–42.

12. *Поляков Н. В.* Современные тенденции развития вычислительной гидромеханики / Н. В. Поляков, А. А. Кочубей, Д. В. Евдокимов // Прикладні проблеми аерогідромеханіки та теплопереносу. — 2008. — С. 12–17.
13. *Bentley J. L.* Writing of efficient programs. — Prentice-Hall : New Jersey.— 2000, 183 p.
14. *Greene D. H., Knuth D. E.* Mathematics for the analysis of algorithms. — Birkhauser : Boston.— 1990, 139 p.
15. *Parberry I., Gasarch W.* Problems of algorithms. — Prentice-Hall : New Jersey.— 2002, 268 p.

Надійшла до редакції 01.09.2009