

Математическое моделирование: философия науки

*Ильин Валерий Павлович,
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
Института вычислительной математики
и математической геофизики
Сибирского отделения РАН*

Проект РФФИ №17-11-20082

Математическая шкатулка Пандоры

«Физика говорит языком математики». Это изречение принадлежит великому Галилею. И, казалось бы, проблема предназначения математики исчерпана. Однако в XXI веке безмятежно эволюционирующее цивилизованное сообщество оказалось ввергнутым в водоворот технологических революций, в результате которых человек становится жертвой гонки мобильных *гаджетов*, экспансии Интернета, компьютерной *игромании*, *кибер-терроризма* и прочих поражающих виртуальных реальностей. И надо сказать, что наступившая эпоха *пост-петафлопсных* суперкомпьютеров и грядущий приход «эксафлопсников» с немислимыми 10^{18} операций в секунду чреватой новой пост-индустриальной эпохой с «облачными» вычислениями, цифровым проектированием, 3D-принтерами, военными игровыми стратегиями, «умными» домами и городами, электронными правительствами и прочими инновациями, призванными перевернуть наши представления об окружающей действительности.

В этой ситуации нас будут интересовать философские аспекты математического моделирования процессов и явлений различной природы, так как именно здесь подспудно сосредоточивается огромный общечеловеческий потенциал в достижении научно-технологического прогресса.

Прежде чем перейти к обсуждению интересующих проблем, разумно конкретизировать рассматриваемые понятия и дать хотя бы краткий исторический экскурс в исследуемую тематику. *Математическое моделирование* определяется как *изучение процессов и явлений математическими методами*. Каждая из используемых здесь категорий требует своего содержательного раскрытия. Процессы и явления подразумеваются в первую очередь реальные — технические, естественные или социальные. В качестве примеров можно назвать производство металла и новых материалов, природные или техногенные катастрофы и демографическую динамику в государстве. Однако актуальным является также изучение и абстрактных моделей, представляемых чисто математически-

ми объектами. Более того, в действительности так и происходит: *физическая* (или химическая, биологическая и т.д.) модель представляется какой-то *математической моделью*, которая практически всегда содержит пренебрежение малозначительными эффектами. И в ее грамотном построении заключается задача *моделлера* (modeller) – уже употребляемое обозначение специалиста, занимающегося моделированием в конкретной прикладной области. Далее нам следует определиться с таким емким понятием, как *математика*, по содержанию которого идут нешуточные дискуссии. Академик Владимир Игоревич Арнольд горячо боролся за единство *теоретической математики* и *теоретической физики*, которые он отождествлял. Однако он фактически не признавал *вычислительной математики* и *информатики*, называя их в своих полемических работах ремесленничеством. Принципиальным оппонентом ему являлся Андрей Петрович Ершов – автор таких ставших азбучными терминов, как *компьютерная грамотность* и *школьная информатика*, который с гордостью говорил о себе: «Я – математик». Мы будем понимать под математикой триединую структуру – теоретическую математику, вычислительную математику и математическое моделирование. Это деление на три составляющие полностью соответствуют самому общему определению: «математика – это наука о математических объектах». Хотя, конечно, полное право на существование имеют и такие распространенные понятия, как *прикладная математика*, *вычислительная информатика*, *вычислительные геометрия и топология* и т.д. В англоязычной литературе имеется общеобиходное словосочетание *Computer Science*, дословный перевод которого «*вычислительные науки*» не очень приживается в русском

языке. Заканчивая терминологические аспекты, следует упомянуть и о таких многочисленных названиях, как *вычислительная физика*, *вычислительная химия*, *вычислительная биология* и др. Данные дисциплины следует отнести, скорее всего, к применению математического моделирования к своим предметным областям или отраслям.

Что касается истории математического моделирования, то его начало относится, по крайней мере, к тем незапамятным временам, когда египетские жрецы предсказывали солнечные и лунные затмения, которые не могли быть сделаны без хитроумных вычислений. Классификации знаний вплоть до древних греков решалась просто, так как существовала только одна наука – философия. Разделение ученых по специальностям началось в Средние века после появления алхимиков и метафизиков. В дальнейшем естественные науки выделились в самостоятельные бурно развивающиеся направления, которые порождали свои индустриальные эпохи, а философы, благодаря таким великим личностям, как Ф. Бэкон, Э. Кант, Г. Гегель, Б. Рассел, Н.А. Бердяев и многие другие стали генераторами общегуманитарных идей, осмысливающими взаимосвязанные процессы познания, развития экономики, техники, социальных структур и личности.

Со второй половины XX века роль научно-технического прогресса кардинально изменилась, так как в результате фундаментальных исследований в мире появилось ядерно-ракетное оружие, которое не только имело политические последствия, но и сделало актуальным философский вопрос о самом существовании человечества.

В последние десятилетия цивилизованное сообщество оказалось ввергну-

тым в новую техногенную революцию, на этот раз связанную с бурной компьютеризацией. Последние 50 лет с высокой точностью выполняется так называемый закон Мура (одного из основателей компании «Intel»), согласно которому мощность ЭВМ увеличивается в 1000 раз за каждые 11 лет. В 2008 году человечество вступило в эру постпетафлопсных компьютеров — 10^{15} арифметических операций в секунду, или флопс), а в 2019 г., соответственно, ожидается пришествие «эксафлопсника», в котором будут уже сотни миллионов и миллиарды вычислительных устройств, что приведет к переходу количества в качество и перевернет наши представления о супервычислениях.

XXI век отличается фантастическим ростом всех наук и технологий, и через два-три десятилетия человечеству предрекают технологическую сингулярность с неисчерпаемой энергетикой, немислимыми новыми материалами, с вечной молодостью и бессмертием. Так или иначе, но грядущие проблемы не смогут быть решены без суперкомпьютерного моделирования, которое становится третьим путем познания и, по предсказанию академика М.А. Лаврентьева, уже является посредником между теоретическими и экспериментальными исследованиями.

За последние одно-два десятилетия человечество претерпело два потрясения, резко изменившие все производственные, общественные и личные отношения, — это интернет и мобильный телефон. Зададимся вопросом: а что будет третьим технологическим шоком? Наш прогноз — это глобальное моделирование. Первые два катаклизма были связаны с информационной стороной компьютерной эволюции. Действительно, рост быстродействия ЭВМ пример-

но пропорционален увеличению объема оперативной памяти и пропускной способности каналов передачи данных, и именно их огромные возможности легли в основу новых информационных технологий. Однако при этом фактически забылось, что ЭВМ изначально задумывалась для вычислений, а не для работы с большими данными. Именно фантастический потенциал высокопроизводительных вычислений призван стать катализатором предсказательного высокоразрешающего моделирования как для получения новых фундаментальных знаний во всех без исключения науках, так и в плане создания нового поколения производственных технологий при переходе к ожидаемому футурологами четвертому экономическому укладу.

Данная работа имеет философско-методологическую направленность, но она никак не претендует на профессиональное осмысление проблем научного познания. По истории и философии науки существует обширная литература, имеются также и более специальные работы по содержанию математики, а также по методологии моделирования, из которых мы приводим только некоторые публикации [1–3].

Что есть истина?

По преданию, именно с такими словами обратился римский прокуратор Понтий Пилат к мятежному Христу, которого к нему привела толпа, разгневанная его покушениями на их сложившиеся государственные и нравственные устои. В итоге сомневающийся Пилат принял роковое решение и, снимая с себя ответственность, символически умыл руки.

В приведенной драме два понятия имеют ключевое значение для математического моделирования — это *истина*

и *принятие решения*. Первая категория имеет очень богатое содержание и характеризует результаты человеческого *познания*. Целью и содержанием моделирования является изучение процессов или явлений, которые можно обозначить философской категорией «*объект*». В данном случае сразу следует отметить такой факт, что *знание может быть абсолютным или относительным*. Последнее означает, что наши данные об исследуемом объекте или предметной области могут быть только приближенными — за отдельными исключениями, лишь подтверждающие общее правило. Пример дилеммы, которая последние десятилетия волнует лучшие умы физиков-теоретиков — есть бозон Хиггса или нет? От ответа на этот вопрос зависит признание или отрицание так называемой *стандартной модели*, определяющей фундаментальные представления о структурах и взаимодействиях микромира и Вселенной.

Как правило, рассматриваемые объекты характеризуются какими-то количественными показателями: пространственными размерами и формами, временными интервалами и скоростями, массами и плотностями субстанций, а также другими свойствами, которые могут быть измерены в каких-то единицах. Здесь уже нельзя обойтись без определения *погрешности*, или *точности* представления модели. Какая-то количественная характеристика φ изучаемого объекта может быть принята за *точное*, или *истинное значение*, в отличие от *приближенного значения* $\tilde{\varphi}$, получаемого в результате моделирования. В нашем случае это будет компьютерный эксперимент, включающий зачастую решение сложной вычислительной задачи, а *абсолютной погрешностью* полученного численного результата будет разность $\delta = \varphi - \tilde{\varphi}$. Если ошибка δ достаточно

мала, то моделирование как инструмент познания дает хорошее описание объекта (можно сказать высокую точность, или разрешение, или предсказательность), а в противном случае — плохое. Мы не будем сосредотачиваться на математических строгостях и формализмах о классах функций φ и $\tilde{\varphi}$, а хотим продемонстрировать философское утверждение, что путь к истине нелегок и нескор. Прежде всего отметим тот принципиальный факт, что понятие приемлемости (или неприемлемости) метода по точности является относительным. Можно говорить о том, что один из методов точнее другого, но нельзя провести четкую границу, разделяющую их на годные и негодные. Далее, величина φ , которая принимается нами за реальную характеристику объекта, определяется из натуральных наблюдений и измерений, поскольку «практика является критерием истины». Однако сами измерения тоже, как правило, проводятся с погрешностями, которые могут быть значительными, и методики достижения здесь надежных результатов представляют свои актуальные научные направления. Более того, иногда натурные эксперименты слишком затруднительны или даже невозможны. В таких случаях приходится привлекать «внутренние» критерии достоверности моделирования. Типичный подход заключается в использовании различных моделей изучаемого объекта, в том числе иерархических, и сопоставлять результаты отдельных численных экспериментов.

Если говорить о погрешности моделирования в целом, то она складывается по крайней мере из трех компонент: $\delta = \delta_n + \delta_m + \delta_c$, где δ_n — ошибка предметной модели (например физической), δ_m — ошибка математической модели, а δ_c — погрешность *вычислительной модели*. Для иллюстрации появления ошибки

физической модели δ_n , скажем, что в задачах гидродинамики иногда пренебрегают вязкостью или изменением плотности и температуры среды, что намного упрощает проблему. Принципиальным является и то обстоятельство, что различные числовые данные, определяющие материальные и геометрические свойства объекта, как правило, известны приближенно.

Для уже выбранной предметной модели можно использовать различные математические постановки: в решаемом функциональном уравнении $L\phi = F$ оператор L может быть дифференциальным или интегральным, или же иметь вариационную форму, а описания его коэффициентов и области определения также могут отличаться, что приводит к различным величинам δ_m . Приведем еще другой актуальный пример: в задачах прогноза погоды используется огромный объем метеорологической и космической информации, и проблема «усвоения данных», чтобы они не противоречили используемой модели, это серьезное научное направление.

Наконец, численная погрешность δ_m зависит от многих факторов: от способа дискретизации исходной непрерывной задачи, метода аппроксимации функциональных уравнений алгебраическими, вычислительной устойчивости применяемых алгоритмов, а также от особенностей конкретной машинной арифметики. Проведение расчетов с необходимой (и достаточной!) для практики точностью δ_c — это прерогатива современной вычислительной математики. Особенностью численных методов является применение семейства алгоритмов, зависящих от счетных параметров, определяющих погрешность результата. Типичной ситуацией является построение в расчетных областях доста-

точно густых сеток с характерным шагом h и применение на них методов аппроксимации исходных уравнений таких, что при $h \rightarrow 0$ асимптотически ошибка пропорциональна величине h^γ , где константа $\gamma > 0$ называется порядком алгоритма. Тогда при измельчении сетки имеется *сходимость метода*, то есть приближенное решение $\tilde{\Phi}$ стремится к истинному Φ , а ошибка δ может быть сделана теоретически сколько угодно.

От знания к мудрости

Существует мнение, что западная цивилизация базируется на знаниях, а восточная — на мудрости, причем последнее понятие подразумевает действия, основанные на личном или чужом опыте. Как мы отмечали, непосредственной целью моделирования является или получение новых фундаментальных знаний (здесь уместно вспомнить поговорку: «ничего нет более практичного, чем хорошая теорема»), или изучение свойств всевозможных процессов или явлений — научно-технических, природных или социальных. Получение знаний, разумеется, не является самоцелью, а «сухим остатком» моделирования должны быть именно какие-то решения, характер которых определяется конкретной областью деятельности.

Поскольку математика является одновременно и служанкой и царицей всех наук, ее универсальный язык применим практически везде. Давно известно, что уровень развития любой отрасли определяется степенью ее математизации, к чему сейчас можно смело добавить и «компьютеризации». Счастливым обстоятельством вычислительных технологий является то, что с помощью относительно небольшого набора основных математических объектов и операций над ними — в пределах нескольких де-

сятков — можно описывать самые различные процессы и явления. Например, одно из относительно простых и широко известных уравнений, носящее имя французского математика Пуассона, успешно используется в проблемах теплопроводности, диффузии, электромагнетизма, газодинамики и т.д. Понятно, что специалисты из этих научно-технических областей имеют разную профессиональную подготовку и даже психологию, и чтобы для каждого из них моделирование приносило существенную практическую пользу в качестве математической инновации, надо проделать большую подготовительную работу. При этом надо понимать, что конкретным инструментом для рассматриваемого абстрактного *пользователя* является компьютер с работающими на нем программами. В целом имеющиеся тенденции свидетельствуют о формировании нового поколения науки о знаниях, разрабатывающей свои *когнитивные* технологии и *онтологические* принципы, реализующие развитие средств *искусственного интеллекта*. Мы не будем задаваться сакраментальным вопросом: а может ли машина мыслить?, поскольку нас интересует более приземленная проблема, можно ли построить систему моделирования, которая решала бы актуальные классы задач?

Технологии решают все

Чтобы сделать моделирование эффективным орудием получения новых фундаментальных знаний и реальной производительной силой, необходимо провести огромную работу по наукоёмкому программированию, вычислительно-информационным технологиям и, что не менее важно, созданию современных организационных структур со взаимодействием разнородных

коллективов разработчиков и пользователей. Особенность данной ситуации заключается в том, что решение стоящей проблемы невозможно не только без сети НИР, НИОКР и ОКР, но и без создания промышленных высоконадежных программных продуктов.

С целью представить масштабы и содержание стоящей проблемы, посмотрим на нее с различных точек зрения, или в разных системах координат. С одной стороны, вопросы моделирования можно классифицировать по отраслям: машиностроение, энергетика, природопользование и химическая промышленность, биология и медицина, строительство и транспорт, сельское хозяйство и т.д., — которые определяют главные направления потоков человеческих и финансовых ресурсов. В то же время все решаемые при этом задачи могут быть разделены по математическим постановкам: системы уравнений Максвелла (*электромагнетизм*), Навье—Стокса (*газодинамика*) и Ламе (*упругопластичность*), уравнения *теплопереноса* и *многофазной фильтрации*, системы *квантовой механики* и *кинетической теории* Больцмана, — которые имеют богатую внутреннюю систематизацию и одновременно разнообразные формулировки в виде дифференциальных, интегральных и/или вариационных соотношений. При этом наибольший практический интерес и сложность представляют собой *междисциплинарные* задачи, описывающие взаимодействия процессов или явлений различной природы и представляемые совокупностью различных функциональных уравнений.

Важно также указать, что все математические задачи делятся на *прямые* и *обратные*. К первым относятся относительно «простые», когда все исходные

данные известны и по ним требуется найти искомое решение. В обратных же задачах постановки содержат неизвестные параметры, которые необходимо определить по дополнительным условиям, включающим минимизацию заданного *целевого функционала* и удовлетворение каким-то *ограничениям* на свойства данных. Решение обратной задачи основывается на многократных расчетах прямых задач при направленном переборе параметров с помощью обширной теории *методов оптимизации*. Необходимо сказать, что наибольшую ценность для инженера или другого производственника представляют именно обратные задачи, к которым относятся проблемы автоматизации проектирования каких-то устройств, оптимизация режима эксплуатации оборудования, а также многочисленные постановки с идентификацией параметров модели.

Понятно, что для всего многообразия математических задач вычислительных методов существует очень много, в этой области существует огромный мировой поток специальных публикаций, и мы не будем останавливаться даже на простом перечислении их основных направлений. Однако стоит заострить внимание на таких важных понятиях, как плохой, хороший или наилучший алгоритм. Можно ввести следующее определение: *метод называется оптимальным для решения заданного класса задач с требуемой точностью на указанной вычислительной системе, если он позволяет получить результат при минимальных ресурсных затратах*. Как видно, даже для фиксированного набора алгоритмов наилучшие из них могут оказаться разными в зависимости от типа задачи, гарантированной погрешности результатов и применяемого компьютера. Отсюда следует,

что попытка оптимизировать метод в конкретном случае, как правило, будет дороже, чем решить задачу каким-то приемлемым способом. Здесь особенно важно подчеркнуть, что грамотное проведение вычислительного эксперимента требует высокого профессионализма. В качестве примера можно сказать о таком необходимом этапе, как верификация алгоритма, что подразумевает доказательство того, что он действительно надежно решает поставленную задачу. Если этого не делать, то может оказаться, что демонстрируемые красивые результаты не имеют отношения к реальности, а являются компьютерными артефактами.

Наконец, необходимо представить, что представляют собой вычислительно-информационные технологии решения больших задач (в том числе междисциплинарных и обратных) на суперЭВМ. Прежде всего, это огромные объемы прикладного программного обеспечения, которые могут быть сделаны только согласованной кооперацией значительного количества групп разработчиков. Очень важно обеспечивать возможность переиспользования имеющихся программных продуктов, в которых за многие годы накоплен ошеломительный интеллектуальный потенциал. Очевидное условие для инструментов математического моделирования — высокая производительность исполнения на современных многопроцессорных вычислительных системах (МВС) со сложной архитектурой разнородных процессорных устройств, работающих на распределенной и общей иерархической памяти. Счастливым обстоятельством в океане задач и алгоритмов моделирования — это четко разделенные *технологические стадии* (геометрическое и функциональное моделирование, дискретиза-

ция и аппроксимация исходной задачи и т.д.), которые могут разрабатываться достаточно автономно на принципах согласования промежуточных *структур данных*.

Следует сказать, что к настоящему времени на мировом рынке имеется большое количество коммерческих и общедоступных пакетов прикладных программ (ППП) для решения определенных классов задач математического моделирования. Однако стратегическая концепция нового поколения заключается в создании интегрированного вычислительно-информационного окружения с длительным жизненным циклом и участием широкого круга разработчиков при тесном взаимодействии ученых с инженерами. Формирование получаемой *базовой системы моделирования* (БСМ) должно удовлетворять определенным научно-производственным принципам:

- гибкое расширение состава вычислительных модулей с автоматизацией построения новых математических моделей и алгоритмов; данное условие является естественным в силу непрерывного развития новых вычислительных методов и технологий;
- адаптация к эволюции компьютерных платформ с высокопроизводительным отображением алгоритмов на архитектуру МВС;
- эффективная эксплуатация в рамках технологий *«облачных вычислений»* на вычислительных центрах коллективного пользования (ВЦКП) с удаленным доступом через Интернет.

Конечная цель рассматриваемой БСМ — переход от кустарного производства отдельных ППП к индустриальному созданию прикладного

математического и программного обеспечения на основе системного подхода и общей инструментальной базы, позволяющих в разы поднять производительность труда разработки и применения конечных продуктов.

Камо грядеши?

Возникает законный вопрос: а какая цель оправдывает средства, необходимые для осуществления рассматриваемого мегапроекта? Существует очевидный ответ. Это массовая востребованность моделирования практически во всех сферах человеческой деятельности. Однако вопросы тактики и стратегии управления социально-экономическими процессами, которые неизбежно возникнут в предстоящей эпохе пост-индустриализации, еще требуют глубокого осмысливания. Рассмотрение интересующей нас проблемы можно начать с верхнего уровня — с образа ученого-энциклопедиста; здесь примерами являлись физики-теоретики Ландау и Фейнман, по учебникам которых учился весь мир в конце XX века. За прошедшие десятилетия науки настолько усложнились, что в мозге одного человека уже практически невозможно охватить весь необходимый объем знаний. И здесь палочкой-выручалочкой оказывается суперкомпьютер, который не только может дать любую справочную информацию, но и практически мгновенно решить задачу (с наглядным представлением!), на которую по «старым технологиям» ушли бы долгие часы и дни кропотливых аналитических исследований. Подчеркнем, что у такого ученого новой формации появляется могучий интеллектуальный помощник, но окончательное слово и решение остается за человеком.

Перейдем теперь к потенциальным массовым пользователям моделирующих компьютерных систем. Здесь в определенном смысле ситуация оказывается понятнее, но она имеет далеко идущие социальные последствия. Легче всего рассмотреть производства, связанные с системами автоматизации проектирования (САПР), которые давно имеют свои огромные рынки разнообразных продуктов: CAD, CAE, CAM, PLM. В этой области уже длительный период происходит *конвергенция* продуктов САПР с программными моделирующими системами, образующих единый производственный цикл: конструкторская документация на изделие (самолет, автомобиль и др.) подается в ЭВМ, где проводятся необходимые расчеты с оптимизацией, а результаты выдаются опять же в заводских форматах и непосредственно идут, например, на станки с числовым программным управлением. При этом кардинально могут быть сокращены дорогостоящие и длительные натурные испытания на аэродинамику, прочность и разрушение, что дает в итоге значительный экономический эффект. Очевидно, что в таких условиях возникают качественно новые требования к подготовке практически всего инженерно-технического персонала, и речь идет фактически о появлении новых массовых

профессий. То же самое можно сказать и о других высокотехнологичных отраслях, вовлеченных в ключевые сферы наноматериалов, биотехнологий, новых методов георазведки и добычи полезных ископаемых, сберегающей энергетики и т.д.

Описанный путь в техническом плане может быть пройден за короткие исторические сроки, а главная проблема, которая здесь возникает, заключается в массовой подготовке новых кадров. Речь идет о целом поколении специалистов в супервычислениях и экстремальном математическом моделировании. Необходимы новые учебные программы и курсы в широком спектре дисциплин суперкомпьютерного образования, нужны курсы переподготовки уже сложившихся специалистов и преподавателей. Фактически речь идет о преодолении складывающегося мирового кадрового кризиса, явившегося следствием закона Мура, и те сообщества, которые осознанно приложат необходимые силы для его преодоления, выйдут на путь «светлого будущего» суперкомпьютерной цивилизации.

В заключение я выражаю искреннюю благодарность кандидату философских наук Марии Ивановне Лелековой, инициировавшей и консультировавшей автора данной работы.

Литература

1. **Лебедев С.А. (ред.)**
Основы философии науки. – М.: изд. Академический Проект, 2005.
2. **Арнольд В.И.**
Что такое математика? – М.: МЦНМО, 2004.
3. **Ильин В.П.**
Фундаментальные вопросы математического моделирования. // *Вестник Российской Академии Наук*, 2016, т. 86, N 4, 26–36.