

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

A. Samarskij

Současná aplikovaná matematika a počítačové modelování

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 30 (1985), No. 1, 1–14

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139157>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1985

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

Současná aplikovaná matematika a počítačové modelování

Akademik A. Samarskij

Sovětsí odborníci se aktivně podílejí na řešení zásadních úkolů rozvoje vědy a techniky, národního hospodářství a celé společnosti. V současné době, kdy se vědecký výzkum stal bezprostřední výrobní silou, tomu ani jinak být nemůže. Tímto směrem jsou zaměřena koncepční stranická usnesení, dokumenty stranických sjezdů i plén ÚV KSSS. Pro zrychlení vědeckotechnického rozvoje je třeba využít všechny možnosti, které mají vědečtí pracovníci k dispozici.

Rád bych zde posoudil úlohy a perspektivy *aplikované matematiky* — a nejenom z pozice úzké profese. Moje snaha je dána tím, že tento odborný směr hraje stále zřetelnější roli v mnohých oblastech vědeckotechnické revoluce.

Vypuštění prvního sovětského umělého satelitu Země a let Jurije Gagarina do kosmu i jeho úspěšný návrat na Zem by byly neuskutečnitelné bez všestranného nasazení metod aplikované matematiky — například bez předcházejícího detailního „přehrání“ letu na samočinných počítačích. Výsledkem byly vědecky podložené záruky úspěchu těchto významných experimentů uskutečňovaných poprvé v historii lidstva. Do praxe kosmonautiky se natrvalo dostaly výpočty trajektorií kosmických aparátů a jejich vstupů do atmosféry, plánování a pozměňování režimu práce jejich motorů i samonaváděcí a automatické kosmické komplexy s palubními počítači. Tyto neojedinělé případy, známé každému člověku, dokumentují značné možnosti aplikované matematiky, která v současné době přechází k *bezprostřednímu modelování* a spolu s ním k optimalizaci a předpovídání vývoje nejrůznějších složitých procesů, jevů, technických systémů a i jejich řízení. Je proto samozřejmé, že otázka rozvoje aplikované matematiky má celospolečenský význam.

Těší nás úspěchy a výsledky práce sovětských lidí. Současně s tím si však zřetelně uvědomujeme, že i značné energetické a surovinové zdroje a pracovní potenciál našeho státu nejsou ani zdaleka nevyčerpatelné. Tím jsou našemu rozvoji vymezeny celkem pevné hranice vyžadující rychlé řešení většiny důležitých úkolů. Kritičnost situace se též prohlubuje s rostoucím vlivem průmyslové a zemědělské výroby na životní prostředí.

Přítom řešení — např. energetických a ekologických problémů, otázek plánování a řízení ekonomiky i zaměření technologických procesů — do značné míry definuje naši budoucnost a nemůže být odkládáno na neurčito. V podmínkách stále se zrychlujícího

„explozivního“ rozvoje lidstva je třeba počítat nikoli s desetiletími, ale s jednotlivými roky. Při tom všem je životně důležitý komplexní přístup k řešeným úlohám s rozvahami podloženými vědeckou prognózou všech bezprostředních i budoucích následků prováděných akcí. Rovnováha existující v přírodě je např. neobyčejně křehká a – jak ukazuje často znepokojující praxe – zacházet s ní je možno jen s velkou opatrností.

Evidentní nutnost rozvoje principiálně nových metod pro návrh a realizaci řešení má nevyhnutelně vliv na naše představy o cílech a způsobech poznání, na psychologii vědeckých pracovníků i na rozvoj vědy jako takové.

K současné vědě se též váží požadavky efektivnosti, kvality a ekonomičnosti – za hlavní se považuje *kritérium cíle a času*. Vědečtí pracovníci jsou odpovědní za výsledky své činnosti. Do popředí vystupují formulace přesného zadání a termínů výzkumu, jeho orientace na nejzávažnější otázky a možnost jeho operativní modifikace, spojení úsilí vědeckých pracovníků a zvýšení efektivnosti jejich práce, industrializace vědy a její spojení s výrobou.

Je aplikovaná matematika schopna přijmout tuto historickou výzvu a zajistit si svou pozici ve všeobecném vývoji? Jakými novými prostředky toho dosahuje? Jde o otázky zdaleka ne řečnické... Vždyť dosud přetrvává názor o matematice jako vědě jen pro matematiky. Jindy opět slyšíme, že matematik se ve skutečnosti zabývá jen tím, k čemu jej vede jeho „vnitřní potřeba“, vždyť matematika existující po celé věky nashromáždila již celou řadu výsledků, a tak podobně. Přitom se často argumentuje nutností rozvoje základního výzkumu. Zajisté, bez základního výzkumu by se věda rychle zjednodušila na „přízemní empirismus“. V každé vědě – tedy i v matematice – se organicky kříží a vzájemně doplňují dva směry: řešení základních problémů a aplikační práce. Vést mezi nimi ostrou hranici není možné. Ve shodě s tím je třeba chápat termín „aplikovaná matematika“ nikoli doslovně – nevyjadřuje žádné metodologické zjednodušení této disciplíny (vždyť aplikovaná matematika využívá všechnen nutný arzenál matematických prostředků), ale její orientaci na řešení současných náležitých úkolů. Mezi oběma vědeckými orientacemi existuje vždy rozumný kompromis odpovídající konkrétní historické situaci. Nyní jsme nuceni přijmout daná omezení a věnovat pozornost „orientovanému“ základnímu výzkumu zaměřenému na hlavní směry rozvoje společnosti. Jiný přístup by mohl být v současných podmínkách ke škodě.

Moje hluboké přesvědčení spočívá v tom, že matematici nejenom mohou, ale jsou povinni na sebe vzít ve srovnání s dneškem větší díl odpovědnosti za řešení neodkladných a složitých úloh našeho rozvoje.

Toto přesvědčení spočívá na vlastní bezmála čtyřicetileté zkušenosti s prací v oblasti aplikované matematiky. Tento vědecký směr nevznikl samozřejmě až nyní – matematika vznikla nejprve jako aplikovaná disciplína nutná k získání astronomických poznatků (viz. K. Marx, B. Engels, Spisy, sv. 20). Aplikovaná matematika má dávno existující metody, tradice, výsledky.

Ovšem za posledních 35–40 let došlo v aplikované matematice k podstatným změnám, které zásadně změnilly její charakter a zvýšily možnosti jejího použití k řešení podstatných současných úkolů vědy a techniky. Tyto změny se mohly uskutečnit díky na první pohled náhodné, ale ve skutečnosti zákonité souhře dvou faktorů: vzniku samočinných počítačů a vzniku principiálně nových úloh dosud nebývalé složitosti,

jejichž důležitost ukázala spíše praxe než věda (a speciálně spíše praxe než matematika). Máme na mysli ovládnutí energie jaderného štěpení i jaderné fúze a vývoj létajících strojů schopných pronikat do kosmického prostoru.

V prvních samočinných počítačích – hromotlucých a nespolehlivých – nebylo snadné spatřovat počátek nové vědecké metodologie. Velký sovětský matematik a organizátor vědeckého výzkumu akademik M. V. Keldiš byl jedním z prvních, kteří ocenili roli samočinných počítačů, a vynaložil nemálo úsilí na jejich zdokonalování a zavádění do praxe. Poprvé za celou historii vědy dostali odborníci, kteří měli do té doby k dispozici jen pero a papír, dokonalý nástroj odpovídající požadavkům rozvoje vědy a techniky. Ne náhodou se současná aplikovaná matematika často (a oprávněně) ztotožňuje s počítačovou matematikou. Počítačová matematika zajistila teoretické základy pro vybudování raketové jaderné obrany našeho státu a jaderné energetiky (viz *Glavnyj teoretik kosmonavtiki* – ve sborníku „Šťastě tvorčeskich pobed“, Moskva, Politizdat, 1979).

V oné době se začala nová etapa rozvoje aplikované matematiky. Neměřitelně se rozšířila její „sféra vlivu“ – od výpočtů a projekce strojů i konstrukcí k poznávání mechanismů srdeční činnosti, od analýzy procesů mikrosvěta k výzkumu otázek vzniku a vývoje vesmíru. Sovětská věda má v této oblasti pevnou pozici – byly u nás vytvořeny a mnoho let úspěšně pracují vědecké školy a týmy vysoce specializovaných matematiků-informatiků.

Vznik samočinných počítačů umožnil značné rozšíření intelektuálních možností člověka a rozlet jeho duševních sil. Současné počítače vykonávají milióny i desítky miliónů operací za sekundu a jsou schopny schraňovat a potřebným způsobem rychle zpracovávat velké množství informace, které nevyhnutně vzniká v průběhu výpočtů. Protože jsou též vybaveny prostředky pro kontakt s člověkem, osvobozují jej od množství rutinní práce a dovolují efektivní řízení nástrojů výzkumného procesu. Tím se počítače stavějí do jedné řady s radioteleskopy, lasery, urychlovači částic a jinými významnými přístroji i zařízeními nezastupitelnými při poznání a zdokonalování světa.

Současně je však třeba mít na zřeteli, že počítače samy o sobě jsou jen nástrojem a nemají žádné vlastnosti kamene mudrců. Je neobyčejně důležité dodržovat správnou koncepci jejich používání. Možnosti počítačů jsou otevřeny jen ve spojení se všemi existujícími metodami výzkumu, s využitím veškerých dosavadních zkušeností. Mnohaleté a nelehké pokusy a omyly vyústily v aplikované matematice v novou výzkumnou metodu – *v počítačové modelování* (neboli – jak se též říká – v matematické modelování, matematický či počítačový experiment).*)

Co se tím rozumí? Stručně řečeno – *vytváření a výzkum matematických modelů zkoumaných objektů pomocí samočinného počítače.*

Zajisté je zde vhodné slovo „experiment“. Při počítačovém modelování máme co činit nikoli se zkoumaným originálním objektem nebo jevem, ale s jeho teoretickým „odlitekem“, s modelem vyjadřujícím v matematické podobě podstatné zákonitosti, kterými

*) Termínu „*vyčíslitelnyj eksperiment*“ použitému v originále odpovídá český termín „*počítačové modelování*“ označující celou výzkumnou metodu. Termín „*počítačový experiment*“ se v české literatuře používá dosti zřídka a spíše jako označení jednoho konkrétního výpočtu při pokusech s nějakým realizovaným modelem. (Pozn. překl.)

se originál řídí. Jak ukazují mnohé zdařilé příklady z různých oblastí přírodních věd i techniky, tento „odlitek“ může být vytvořen velmi obratně a přesně. Při výzkumu pomocí počítačového experimentu je pak zkoumán model jakoby s představou, že je zkoumán sám originál (technická konstrukce, technologický proces či přírodní objekt). Modelu jsou zadávány otázky a získávány přesné a relativně úplné odpovědi.

Možnost záměny výchozího originálu jeho matematickou „kopii“ a možnost dalšího „dialogu“ s ní v sobě skrývají značné přednosti a naznačují změnu nejenom metodologie, ale i technologie vědeckého výzkumu. Ve skutečnosti vzniká nový, moderní styl práce jak jednotlivých vědeckovýzkumných pracovníků, tak styl práce jejich týmů. Možno říci, že metoda počítačového modelování uzrávala v aplikované matematice v průběhu celého poválečného období. Nyní je aplikovaná matematika schopna předat tuto metodu fyzikům i biologům, chemikům i lékařům, technikům i konstruktérům. Nevyhnutnost širokého použití matematického modelování pro realizaci komplexních státních vědeckotechnických plánů je čím dál tím zřejmější.

Počítačové modelování — nová metodologie a technologie vědeckého výzkumu

Koncepce počítačového modelování je v současné době podrobně propracována, jsou dobře známy jeho silné stránky i problémy jeho rozvoje. Etapy realizace počítačového modelu jsou skutečným konkrétním obrazem objektivního procesu poznání — od abstrakce až po aplikaci získaných výsledků v praxi.

V prvním kroku je třeba *formulovat matematický model*, tedy „matematický obraz“ zkoumaného objektu. Prvotní obraz je nutno zbavit „náhodných rysů“ — ze všech charakteristických vztahů je nutno vybrat ty nejpodstatnější. Tyto vztahy se zpravidla zapisují formou rovnic vyjadřujících základní přírodní zákony (např. zákon zachování energie), aplikované na daný originální objekt*). Samotné objekty mohou být velmi různé co do své podstaty a svého určení — fyzikální nebo biologické jevy, technologické procesy i mechanismy nebo konstrukce.

Idealizace, tedy zjednodušení výchozího jevu, je na počátku každého vědeckého výzkumu. Co nového přináší počítačové modelování? Jeho zásadní předností je, že umožňuje efektivní výzkum složitých a úplných matematických modelů všestranně popisujících originál. Obvyklé matematické metody skýtají možnost výzkumu jen

*) Zápis matematického modelu pomocí rovnic (nejčastěji diferenciálních nebo integrálně diferenciálních) není zdaleka jediný možný. Takový zápis modelu pomocí rovnic se používá prakticky jen v tzv. čistě spojitéch modelech, kdy o originálu sledovaném v nějakém omezeném časovém intervalu předpokládáme, že všechny jeho parametry se mění pouze spojitým způsobem. Zápis modelu „klasickými“ rovnicemi není obvykle použitelný v případě tzv. diskrétních modelů, jimiž zkoumáme systémy a jejichž časovou i stavovou množinu považujeme za konečnou (nejčastějším případem jsou modely systémů hromadné obsluhy). K exaktní formulaci matematického modelu se pak používají konečné automaty, Petriho sítě apod. Výjimkou není ani exaktní popis modelu v přirozeném jazyce. V posledních 10—15 letech jsou vytvářeny i speciální tzv. deskripční jazyky — analogie programovacích jazyků — které mají přesně definovanou syntaxi i sémantiku a které se používají ne k zápisu algoritmů pro samočinný počítač, ale k zápisu datové struktury a algoritmů navrhovaných modelů. (Pozn. překl.)

relativně jednoduchých modelů (jen omezených partií zkoumaných procesů) a ve většině prakticky důležitých případů jsou vhodné jen v prvopočáteční etapě výzkumu.

Klasická matematika se zabývala ponejvíce lineárními úlohami a získala na tomto poli nemalé výsledky. V matematickém slova smyslu lineárnost znamená, že součet (superpozice) libovolných částečných řešení daré úlohy je též jejím řešením. V širším smyslu lineárnost charakterizuje shodnost části a celku, možnost předpovídat chování celku podle chování jeho osamocených fragmentů. Tato vlastnost (princip superpozice) je podle tradiční metodologie široce používána při vytváření obecných teorií.

Ovšem praxe ukazuje, že jsme vstoupili do doby výzkumu nelineárních jevů. Například úlohy termiky jsou nelineární v těch případech, kdy se znatelně mění stav objektu (řekněme jeho teplota). Nelineární objekty jako celek nejsou součtem svých skladebných částí. Navíc se mohou značně měnit při svém vývoji. Odtud vyplývá velký nárůst matematických problémů, neboť není známo, jak vytvořit dostatečně obecnou teorii při použití klasických přístupů.

To ale není ta největší obtíž. Velmi často jsou jednou z vlastností nelineárních systémů nespojitě, skokem se měnící charakteristiky jejich chování (se změnou někdy zcela opačnou proti našemu očekávání). Přitom se vnější podmínky mohou měnit spojitě a podle našich představ i „rozumným“ směrem. Není tedy zpravidla možné předpovídat chování nelineárních objektů pouze na základě předchozí zkušenosti. Jako charakteristický a téměř každodenní příklad takových jevů můžeme uvést atmosférické procesy mající vliv na stav počasí.

Současně je však nutný rozvoj metod výzkumu nelineárních úloh. Jednou z nich je právě počítačové modelování. Samozřejmě se počítačový model používá i při výzkumu lineárních objektů, které mají složitou strukturu, závisí na velkém počtu parametrů apod. Jeho hlavní doménou jsou však právě nelineární úlohy.

Vytvoření matematického modelu je jenom prvním krokem. Je nutné prozkoumat jeho chování, tj. řešit rovnice, které jsou v modelu obsaženy, při různých hodnotách parametrů popisujících řízení procesu. K tomu se používá základní teoretický aparát počítačové matematiky – *numerické metody* (výpočetní algoritmy)*).

Ty dovolují získat s dostatečnou přesností přibližné řešení i velmi složitých úloh po provedení konečného počtu aritmetických operací. I když byly první numerické metody pro řešení některých úloh vypracovány již Newtonem nebo Eulerem, jejich produktivita byla plně pochopena až v souvislosti s počítačovým modelováním. Současná teorie numerických metod je rozvíjejícím se odvětvím matematiky, které má výsledky zásadního charakteru. Zdokonalováním numerických metod jsou snižována omezení na složitost zkoumaných matematických modelů.

Výběr výpočetního algoritmu je druhou etapou počítačového modelování. V další etapě je třeba vytvořit *program pro samočinný počítač* realizující vybraný algoritmus – tedy „převádějící“ jej do jazyka srozumitelného samočinnému počítači.

Je třeba si povšimnout, že se v matematice objevil nejen vlastní nástroj, ale i vlastní „technologie“. Její důležitou částí jsou *balíky problémově orientovaných aplikovaných programů*. Složitost moderních programů a jejich požadavků stále stoupá. Současně s tím je vytvářeno veliké množství algoritmů pro řešení široké třídy úloh. Vznikají tak problémy s efektivní výměnou získaných zkušeností, se standardizací fondu programů i jejich dostupností a s odbouráváním nepotřebně zdvojených prací.

*) Jsou myšleny algoritmické metody pro numerické řešení spojitých modelů (viz předešlou pozn.). Prostředky podobné způsobem použití existují i pro řešení diskrétních modelů. Ne zcela vyřešeny jsou po této stránce některé otázky tzv. kombinovaných modelů, ve kterých jsou spojeny oba přístupy – spojitý i diskrétní. (Pozn. překl.)

Balíky aplikovaných programů představují možnost úschovy relativně jednoduchých hotových programů (modulů), z nichž je možno automaticky sestavovat složité programy – podobně jako se z univerzálních elementů konstruuji různé architektonické stavby.*) Programy v balících jsou vybaveny přesnými prostředky pro „komunikaci“ s člověkem, které umožňují operativní přístup širokému okruhu spotřebitelů, kteří nemusí ztrácet čas a energii na podrobné studium jejich struktury. S rozvojem programových balíků získává činnost matematiků rysy průmyslové výroby, přičemž v konečném efektu této výroby jsou zkoncentrovány výsledky a zkušenosti jedné z nejméně efektivnějších forem lidské práce.

Emocionálně podbarvenou a dramatickou etapou počítačového modelování je provádění výpočtů na samočinném počítači podle sestaveného programu. V mnohém je tato etapa podobná normálnímu experimentu. Na počítači (experimentální aparatuře) se provádí série výpočtů (měření), na jejichž základě dostává výzkumný pracovník série čísel popisujících chování objektu.

V závěrečné etapě se provádí analýza výsledků, které se konfrontují s čistě teoretickými prognózami a hodnotami získanými při faktickém pokusu s originálem. Stává se zřejmým, byl-li matematický model a výpočetní algoritmus vhodně zvolen. V případě potřeby se zpřesní a cyklus počítačového experimentu se opakuje na dokonalejším základě**).

Obvykle považovali matematici svoji úlohu za skončenou, podařilo-li se dokázat, že řešení úlohy principiálně existuje. Nyní získává pojem „řešit úlohu“ širší smysl. Výsledkem počítačového modelování jsou praktická doporučení, která postihují zadaný cíl a jsou konkrétně a detailně vyjádřena v přesné kvantitativní formě (např. zlepšení nějakých parametrů originálu).

V souvislosti s realizací počítačového modelu vznikají četné další otázky. Především je třeba stanovit, jaká je oblast jeho použití. Počítačové modelování je určeno pro studium, prognózování a optimalizaci složitých mnohoparametrických nelineárních procesů, jejichž teoretický a experimentální výzkum je pomocí tradičních metod obtížný nebo nemožný. Např. práce vysoké pece závisí na takovém množství vzájemně se ovlivňujících faktorů, že nemůže být do detailu popsána pomocí jednoduchých teoretických

*) Automatickost sestavení složitějšího programu ze speciálních modulů obsažených v balíku nelze chápat doslovně. Balíky programů jsou v počítači uloženy (ve zvláštním tvaru) v tak zvané knihovně, z níž je možno připojovat moduly k uživatelským programům. Připojení se provádí tak zvaným sestavovacím programem na základě exaktního požadavku autora celého programu, který musí explicitně určit, který modul a z jaké knihovny má být připojen, a dále pro každé použití modulu určit, jak mají být předány vstupní a výstupní údaje apod. (Pozn. překl.)

***) K takovému postupnému zdokonalování modelu (přesněji řečeno zdokonalování našich představ o tom, co je možno z vlastností zkoumaného originálu pominout a co nikoli) dochází prakticky ve všech případech použití počítačového modelování. Zdokonalování modelu však nelze bohužel provádět až k dosažení „předem zvolené přesnosti“, neboť často proti sobě stojí přesnost vyjádření originálu v modelu a nároky výpočtů modelu na operační paměť počítače a zejména na strojový čas. Jde o to, že musíme dospět k modelu, který je nejenom přijatelně přesný, ale který lze též instalovat na dostupném počítači a jehož výpočty je možno provádět v přijatelném čase. Tato skutečnost je jedním ze základních problémů počítačového modelování vůbec. (Pozn. překl.)

prostředků. Faktické modelování v menších rozměrech poskytne jen částečnou informaci o její práci. Mezi gigantickým průmyslovým komplexem a nevelkou experimentální aparaturou nemůže být úplná prostoročasová shoda (chybění fyzikální analogie je typickou situací ve většině současných vědeckotechnických úloh). Provedení série pokusů v plném měřítku originálu je problematické jak pro jejich cenu, tak pro jejich vleklost.

V mnohých případech je faktický experiment nebezpečný nebo může být proveden pouze jednou (změna stavu ekologických systémů, řízení počasí), potřebuje mnoho času (šlechtitelská činnost) nebo je prostě nemožný (zdraví člověka, geofyzikální i astrofyzikální procesy – nelze např. reprodukovat činnost Slunce, ovšem matematické modelování jedenáctiletých cyklů jeho aktivity poskytuje klíč k pochopení tohoto vážného jevu).

Ve všech obdobných situacích je počítačový model naprostou nutností, neboť se mnohonásobně zkracuje doba a snižuje cena výzkumu, snižuje se počet potřebných vědeckých pracovníků, techniků a dělníků, stoupá oprávněnost přijímaných řešení.

Když již hovoříme o „ekonomičnosti“ počítačového modelování, nelze nezpomenout důležitou vlastnost matematických modelů – jejich *univerzálnost*. Tuto okolnost zdůraznil svého času v závažné práci *Materialismus a empiriokriticismus* V. I. Lenin: „Jednota přírody se projevuje v ‚zarážející shodě‘ diferenciálních rovnic vztahujících se k různým oblastem jevů.“ (Sebr. spisy, sv. 18.) Např. matematické modely přenosu tepla, mísení látek, pohybu podzemních vod a filtrace plynu v hlubinných vyvřelinách jsou prakticky stejné (různý smysl mají jen veličiny, které v nich vystupují).*

Odtud plyne, že výpočetní prostředky (samočinné počítače, algoritmy, balíky programů) vytvořené v souvislosti s jednou úlohou *mají univerzální charakter a mohou být snadno přeorientovány* na řešení zcela jiných úloh. Výzkumné týmy pracující s takovými prostředky se tímto způsobem stávají dynamickou částí našeho strategického potenciálu.

Výzkumní pracovníci, kteří pracují v oblasti matematického modelování (ostatně je tomu podobně i při používání jiných druhů modelů) se často střetávají s bezděčnou otázkou: nakolik je možno věřit výsledkům modelování. Vždyť nezkoumáme samotný originál, ale jeho matematický model... Jak je řešena tato odvěká filozoficko-metodologická otázka v daném případě?

Především poznamenejme, že *sestavení modelu pro počítačový experiment není spekulativní záležitost* prováděná na „pustém ostrově“. Takové sestavení modelu je založeno na všech známých experimentálních výsledcích a teoretických hypotézách, na veškeré dosud získané zkušenosti. Kromě toho předpokládají etapy realizace počítačového modelu „vnitřní kontrolu“ garantující bezspornost vybraného modelu, dostatečnou „řešitelskou schopnost“ algoritmu, správnou funkci programu atd.**)

*) Podobnou shodu ve tvaru jednotlivých elementů (byť s různým významem) lze nalézt i v diskrétních modelech (viz pozn. na str. 4). V modelech systémů hromadné obsluhy se např. opakují stejné frontové disciplíny apod. (Pozn. překl.)

***) Exaktně chápaná „zpětná kontrola“ jednotlivých etap vytváření počítačového modelu je myslitelná jen u programové realizace modelu. Vypracovaný program je teoreticky možno verifikovat

nesporným kritériem je *porovnání získaných výsledků s praxí a zpřesňování modelu*.

V takovém procesu se model „kalibruje“ – ozřejmují se oblasti jeho použitelnosti a vytváří se soubor „etalonových“ modelů, které se dále zkoumají jako samostatné objekty.

Postupný „technologický cyklus“ počítačového modelování je závitem spirály v procesu získávání vědecké jistoty a jednotlivé výsledky jsou soustavou relativních jistot, z nichž každá dialekticky popírá předcházející a stírá vzniklé spory. V procesu rozvoje a konfrontace s praxí počítačový model „přichází k rozumu“ a jeho výsledky se stávají stále věrohodnějšími.

Přibližně řečeno má počítačové modelování dvě základní fáze. První fází je vytvoření soustavy modelů pro soustavu cílů; v této fázi jsou laděny a testovány matematické modely a výpočetní algoritmy, které odpovídají zkoumaným jevům. Druhou fází je všestranné modelování reálného objektu a řízení jeho chování (fáze prognózy a řízení).

Bylo by nesprávné stavět proti sobě počítačový model a faktický experiment s originálem, jak se někdy děje. Přitom se pouští ze zřetele, že doba experimentálních výzkumů založených na bezprostředním smyslovém vnímání již dávno minula. V současném výzkumu máme co dělat nikoli se samotným objektem, ale s jeho projevy, velmi nepřímými a nepřehlednými. Odtud vyplývá, že experimentátor se musí obrátit k nějakému modelu zkoumaného objektu (obvykle velice zjednodušenému).

Je třeba také poznamenat, že v současných experimentech vyžadují výsledky měření složité a pečlivé dešifrování. Za tímto účelem se fakticky realizuje speciální počítačový model pro zpracování a analýzu výsledků měření, který modeluje interakci originálu s měřicí aparaturou (jeho data se používají v „základním“ počítačovém modelu, jímž zkoumáme výchozí objekt). Zároveň však omezovat počítačové modelování jen na interpretaci experimentálních dat by znamenalo znevažovat jeho „futurologické“ možnosti.

V roce 1968 byl poprvé v našem státě zaznamenán vědecký objev získaný jako výsledek počítačového (!) modelu (efekt *T*-vrstvy). Ukázalo se, že při pohybu plazmy v magnetickém poli mohou v ní vznikat tenké, ale stabilní vrstvy s vysokou teplotou, které se svými vlastnostmi liší od okolní plazmy. Proč nebyl tento efekt objeven dříve? Pro jeho uplatnění jsou nutné jisté podmínky, které tehdy nebyly ještě realizovány. Podle údajů z počítačového modelu byly v několika laboratořích „objednány“ a v nutných podmínkách provedeny (již v průběhu 5 let) faktické pokusy, jejichž výsledky byly v dobré shodě s matematickou prognózou.

V současné době se např. efekt *T*-vrstvy používá pro objasnění chromosférických erupcí na Slunci. Po praktické stránce se plánuje postavení průmyslových magneticko-hydrodynamických generátorů elektrické energie podstatně využívajících tento efekt

proti exaktně formulovanému matematickému modelu. Potenciálně by snad bylo možné i „zpětně“ kontrolovat matematický model (nebo alespoň jeho části) proti abstraktní a přesné představě o zkoumaném originálu. Co však není přímo principiálně možno „zpětně“ kontrolovat, je právě tato abstraktní představa o zkoumaném originálu, na jejímž základě matematický model formulujeme. Taková kontrola by vlastně znamenala dokazování, že jsme originální systém, jeho prvky a vztahy mezi nimi správně pochopili. Z toho důvodu je závěrečné srovnání výsledků modelu se známým chováním originálu podstatně důležitější než „zpětně“ prověřování jednotlivých kroků při návrhu modelu. (Pozn. překl.)

(přitom se odstraní některé obtíže s uchováváním plazmy a snižují se požadavky na tepelnou odolnost generátorů). Generátory budou nasazeny v programu využití kausko-ačinského černého uhlí.

Takovým způsobem správný vztah mezi počítačovým modelem a přímým pokusem vede ke zvýšení efektivity vědecké práce. Je to pravdivé i ve vztahu k tradičním teoretickým metodám výzkumu. Vůbec se od nich neodvrácíme, naopak, jejich důležitost pro získávání iniciální informace a testování algoritmů stoupá.

Počítačové modelování též nutně stimuluje rozvoj základního výzkumu. Při modelování fyzikálních procesů potřebujeme např. znát s dostatečnou přesností makroskopické charakteristiky látek (viskozitu, vodivost tepla atd.). Jejich zjišťování je nesporně základním fyzikálním problémem, který vede k řešení velkého počtu úloh kvantové mechaniky. Ovšem tyto výzkumy se neprovádějí libovolně (pro libovolné hodnoty teplot, tlaků, pro libovolné látky), ale „orientovaně“ s vazbou na výchozí objekt.

Samotná organizace počítačového modelování není myslitelná bez kolektivní práce odborníků různých specializací, techniků a konstruktérů, bez rozvoje mezioborového výzkumu. Znalosti a zkušenosti pracovníků týmu zaměřené na dosažení globálního cíle se obohacují a získávají nové hranice. Např. potřeby počítačového modelování vzniklé „pod tlakem“ praxe vedly k rozvoji takových oblastí matematiky, jako je teorie diferenciálních a integrálně diferenciálních rovnic, lineární algebra a teorie automatů. Současně je Počítačové modelování zároveň vhodnou formou kooperace odborné práce a zvyšuje její efektivitu. Sjednocení úsilí a syntéza výsledků nejsou v tomto případě zbožným přáním, ale zřejmou nutností.

Jak zdůrazňuje soudruh J. V. Andropov, je problém rychlého zavádění vědeckých výsledků do výroby stále aktuální. Počítačové modelování skýtá nové možnosti pro jeho řešení. Před deseti – patnácti lety bylo obtížné hovořit o jeho masovém používání například v technologických úlohách. Nyní se to stává reálným.

Současné technologické procesy jsou velmi složité a nelze je zkoumat pomocí „čistých“ pokusů. Ne vždy je k tomu k dispozici experimentální základna a možnost nasazení kvalifikovaných vědeckých kádrů. Proto realizace řetězu „vědecká idea – laboratorní výzkum – poloprovoz – výroba“ vyžaduje mnoho času a sil.

Přednosti matematického modelování dovolují obejít řadu přechodných etap v realizaci vědeckého výzkumu a *orientovat se bezprostředně na průmyslovou výrobu, což by mělo vést k rychlejšímu růstu efektivity práce.*

V dnešní době se počítačové modelování používá např. ke zdokonalování nákladných a citlivých technologických procesů, jako je výroba polovodičových krystalů a vrstev, laserové a laser-plazmatické opracování materiálů či optimalizace teplotního režimu konstrukčních prvků nových samočinných počítačů (poslední případ je příkladem samoobsluhy – počítačové modelování pomáhá vytvářet svou budoucí materiální základnu*). Přitom jsou široce používány speciálně vytvářené balíky aplikačních programů, které jsou postupně předávány bezprostředním uživatelům.

*) Počítačové modely se používají nejenom ke zjišťování, jakým způsobem se bude známý originál chovat v neznámých podmínkách nebo jakým způsobem je možno jeho chování ovlivňovat. Jiným případem použití (typickým třeba pro výzkum živé přírody) je testování hypotéz o struktuře originálu.

Matematici aplikující metody počítačového modelování se těsně přiblížili k výrobním úkolům. Již se nesetkává s údivem jejich účast na formulaci konkrétních technických řešení, racionalizačních návrhů a vynálezů. O tom svědčí například realizovaný matematický model ohřevu kovových dílů automobilů při jejich chemicko-tepelném zpracování. Úloha spočívala v návrhu teplotního režimu na povrchu součásti, při němž by se tato součást rovnoměrně prohřála v minimálním čase. Časová závislost teploty povrchu se ukázala být natolik složitá, že nebylo možné si představit její získání ani obvyklou teoretickou cestou ani pomocí série přímých experimentů.

Technologické úlohy jsou evidentně vděčným polem působnosti. Vždyt i nevýznamné zlepšení technologie zhotovované součásti nebo přístroje skýtá v měřítku závodu a tím spíše v měřítku odvětví citelný efekt.

Jednu z lákavých perspektiv v řešení energetických problémů je uskutečnění řízené termojaderné reakce (syntéza izotopů vodíku, při níž se uvolňuje ohromné množství energie). Jejimi výhodami jsou prakticky neomezené zásoby „paliva“ a ekologická čistota.

Úloha – poprvé formulovaná v našem státě – vytvoření „umělého Slunce“, to jest reaktoru, v němž se plazma zahřívá na velmi vysokou teplotu a uvolňuje energii, je základním fyzikálním a značným inženýrsko-technickým problémem. Existuje několik cest pro realizaci termojaderné syntézy (většina z nich byla navržena sovětskými vědci). Každý projekt se skládá z řady variant a každá varianta je složitou a nákladnou fyzikálně technickou úlohou. Počítačový model dovoluje provést optimální výběr strategie – vystupuje v roli svého druhu nestranného „arbitra“ srovnávajícího výhody a nedostatky různých projektů na základě jednotné metodologie. Tím způsobem se i zde na jeho základě získává čas a šetří síly i prostředky.

Je významné, že při řešení podobných úloh vystupují matematici-informatici a fyzici v jedné řadě jako rovnoprávní spoluautoři nových koncepcí (viz. N. G. Basov: *Lazernyj termojadernyj sintéz* – Priroda, 1983, 1). V současné době se ani jediný projekt termojaderné syntézy – v našem státě i v zahraničí – neřeší bez „vize“ počítačového modelu.

Můžeme s plnou zodpovědností říci, že počítačové modelování, které v sobě sjednocuje výhody teoretických i experimentálních metod výzkumu, je odpovědí aplikované matematiky na naléhavé požadavky současné doby.

Těžkosti, úlohy, perspektivy

Nelze ponechat bez povšimnutí objektivní i subjektivní obtíže bránící zavádění počítačového modelování do praxe. Tento problém má několik stránek.

Z řady příčin nebyly možnosti a úspěchy počítačového modelování známy po mnoho let širokým kruhům vědeckotechnické veřejnosti. Je tedy nutné zesílit propagandu jeho ideí a metod. Zvýšení počtu monografií a populárně vědeckých publikací na toto téma,

Známe-li chování nějakého systému, ale neznáme-li jeho vnitřní strukturu, můžeme pro jednotlivé hypotézy o vnitřní struktuře vypracovat počítačové modely a jejich výsledky porovnávat se známými projevy originálu. Můžeme tak sice jen hypotézy zamítnout, ale i to může být přínosem v případech, kdy nemáme jinou možnost, jak originální systém zkoumat. (Pozn. překl.)

utvoření škol mladých vědeckých pracovníků, plnoprávná účast specialistů informatiků na práci hlavních vědeckotechnických edicí, vydávání mezioborového časopisu „Matematické modelovanie“, pomoc celosvazové společnosti „Znanie“, tisku a televize – to vše jsou nutná opatření ke zlepšení stavu. Jinak „démonická síla“ neznalosti postaví psychologickou bariéru mezi počítačové modelování a jeho potenciální uživatele.

Často se setkáváme s názorem, že matematickým experimentem se mají zabývat jenom matematici – „dáme jim zadání, oni je spočtou a uvidíme...“. To je ale omyl založený na neznalosti. Počítačové modelování je svého druhu mnohotvárná vědecká činnost *přinášející úspěch jenom v tom případě, když je její „technologický cyklus“ uzavřen*, tedy jestliže všechny etapy počínaje formulací zadání a konče analýzou výsledků jsou realizovány na vysoké úrovni.

Návrh matematického modelu nelze např. plně přenést na matematiky*). Při takovém přístupu vzniká nebezpečí „okleštění“ modelů – ztráty jejich souvislosti se zkoumanou realitou. Nedostupnost dobrých matematických modelů je brzdou, která znemožňuje odkrývání nemalých rezerv pro zvýšení efektivity vědecké práce pomocí počítačového modelování. Intenzivnější práce při konstrukci matematických modelů by již nyní v rámci dosavadních možností mohla poskytnout reálnou pomoc rozvoji v mnohých oblastech vědy a techniky. Fyzici, chemici, biologové, technici, konstruktéři a technologové na jedné straně a matematici na straně druhé by měli více vyhledávat společnou řeč.

Jednou z organizovaných forem takové spolupráce je založení sekcí matematického modelování při radách Akademie věd SSSR pro odpovídající komplexní úkoly a vyčlenění institutů koordinujících aplikace počítačového modelování. Zkušenosti z práce na úkolech fyziky plazmatu ukázaly smysluplnost takové organizace – díky ní nyní získává uznání veřejnosti „počítačová fyzika“. Není to pochopitelně jakási zvláštní fyzika, ale směr zkoumající fyzikální jevy a opírající se o počítačové modelování. Nyní je na programu využití získaných zkušeností v jiných oblastech přírodních věd a techniky**).

Postavíme-li otázku širěji, *musíme na počítačové modelování pohlížet jako na nutnou etapu při plánování a řešení velkých projektů*. Zejména je tomu tak nyní v kosmonautice a je to vhodným příkladem pro ostatní odvětví vědeckého výzkumu a národního hospodářství. Kvalitu počítačových modelů a jejich shodu s dosavadní úrovní znalostí by bylo možno kontrolovat například pomocí komisí expertů složených z vysoce kvalifikovaných odborníků, kteří by měli praktické zkušenosti z řešení složitých úkolů.

Jiný typický omyl záleží v tom, že se počítačové modely chápou jen jako provádění výpočtů, jako rutinní činnost technického charakteru. Takový názor (s ním se bohužel

*) Především nelze přenést na matematiky formulování abstrakce zkoumaného originálu (viz. druhou pozn. na str. 7). Je však vhodné, aby se i tohoto stadia matematik zúčastnil. Formulování abstrakce zkoumaného originálu musí být vedeno deduktivně, což bývá někdy zdrojem obtíží v těch vědních disciplínách, jejichž „typické myšlení“ je induktivní. (Pozn. překl.)

***) Z literatury jsou známy i případy použití počítačových modelů ve společenských vědách. Třebas sociologický model mezilidské kooperace ve skupinách s různou „charakterovou“ skladbou. (Pozn. překl.)

setkáváme u mnohých vedoucích pracovníků) souvisí s obsahem tradičního vzdělání, v němž prakticky např. není prostor pro moderní numerické metody. Není proto divu, že nemůžeme poměr mezi výzkumem a aplikacemi považovat za uspokojivý.

Je ovšem jednak pravda, že u některých matematiků existují sklony ke zkoumání numerických metod v rámci čisté matematiky, aniž by byly používány k řešení konkrétních úloh. Musí být explicitně stanoveno, že práce věnovaná řešení prakticky důležitých úloh (buď s použitím dříve vytvořených metodik nebo balíků programů) je cenným vědeckým přínosem. Jednou z aktuálních úloh současnosti je změna psychologie vedoucích vědeckých pracovníků v různých vědeckých oblastech a zaměření dosti velkého počtu sovětských matematiků na rozvoj matematického modelování, numerických metod a jejich aplikací.

A jednak je též pravda, že přísun nových kvalifikovaných kádrů do oblasti matematické informatiky je značně omezen, neboť existující vysokoškolská zaměření a učební plány neodpovídají nynějším úspěchům v této oblasti. Je proto nutná revize výukových plánů a vypracování přednášek z matematiky, mechaniky, fyziky, chemie a biologie zaměřených na výuku matematického modelování a numerických metod používaných v praktických aplikacích počítačových modelů. Též je nutné podstatně zvýšení počtu studentů přijímaných na odpovídající specializace. Při jejich výuce je třeba klást důraz na otázky korektní formulace vznikajících úkolů, na metody výzkumu matematických modelů a na zavádění získaných výsledků do praxe.

V širěji pojatém výhledu by se především přední vysoké školy, v nichž pracuje velké množství vědeckých pracovníků různých specializací, kteří mají k dispozici dostatečně velká výpočetní střediska, mohly stát hlavními metodickými a koordinačními centry počítačového modelování. Nezanedbatelnou rezervou je též využití sil a nadšení studentů vyšších ročníků a aspirantů, jestliže jejich práce nemá jen čistě vědecký charakter, ale je v těsném vztahu k práci vedoucích vědeckých týmů. Mnohaletá zkušenost ukazuje, že při týmové práci nedochází jen k prostému součtu úsilí, ale že výzkum přechází na kvalitativně jinou úroveň. Kromě toho je týmová práce důležitým sociálním faktorem při formování mladých vědeckých pracovníků. Je již zřejmé, že pro výchovu vysoce kvalifikovaných specialistů informatiků je nutné zvát k přednáškám a konzultacím na vysokých školách vědecké pracovníky z akademických i resortních výzkumných ústavů. Je třeba zvyšovat prestiž učitelské profese. Jestliže nedojde k odpovídající přestavbě vysokoškolského studia, setká se rozvoj matematického modelování s velikými obtížemi.

Existuje ještě jedna cesta k řešení kádrových otázek, a tou jsou dlouhodobé stáže vědeckých pracovníků v ústavech pracujících v oblasti matematického modelování. Pozornost též zasluhuje soustava přípravy kádrů na velkých vysokých školách a resortních ústavech pro zvyšování kvalifikace. V obou směrech existují pozitivní zkušenosti, avšak existující možnosti se v potřebné šíři nevyužívají.

Problém kádrů má i druhou stránku. Někdy slyšíme stížnosti na nedostatečné množství výpočetní techniky a její kvalitu. Ovšem rozbor práce některých organizací ukazuje, že se často využívají zdaleka ne všechny možnosti počítačů. V lepším případě se počítače používají jako „velké kalkulačky“, v horším případě se zatěžují jenom periferní zařízení (např. tiskárny).

V čem je příčina takového stavu? Považuje se za „dobrý mrav“, aby téměř každý ústav, závod a organizace měly vlastní výpočetní středisko včetně obsluhujícího personálu (takové snahy jsou principiálně progresivní). Současně s tím se jaksi předpokládá, že samo nasazení výpočetní techniky řeší všechny problémy. Problémům spojeným s výběrem a formulací úkolů a přípravou odborníků ovládajících numerické metody pro jejich řešení se přikládá druhořadý význam. Takový přístup vede k přímo opačným výsledkům, diskredituje matematickou informatiku a zprofanovává její výsledky.

Diskrepance mezi složitostí řešených úloh a výkonností samočinných počítačů je objektivní a dlouhodobý stav. Vzniká tím, že praxe přináší stále obtížnější úlohy, jejichž řešení je na hranici možností výpočetní techniky. Jedinou možností jejího překonání je jednak koncentrace výpočetní techniky ve velkých výpočetních střediscích majících zkušenosti s prací na složitých praktických úlohách a jednak výchova kádrů schopných si osvojit a realizovat počítačové algoritmy (existuje nemálo příkladů úspěšného řešení velmi složitých úloh na počítačích – ve srovnání se zahraničními málo výkonných – díky použití dokonalejších numerických metod).

Poznamenejme, že rozvoj mikroelektroniky slibuje v brzké době mnohonásobné snížení ceny výroby samočinných počítačů a jejich provozu. Hlavní náklady na realizaci počítačových modelů budou spojeny s přípravou kádrů, což vyžaduje, jak známo, delší dobu*). Odtud plyne, že kádrové problémy nabývají na ostroti a že je třeba řešit je bez prodloužení *tempem, které by předběhlo rozvoj výpočetní techniky*.

Akademie věd SSSR a Státní komise pro vědu a techniku koordinují práce na vytvoření a zavedení do praxe problémově orientovaných balíků aplikačních programů určených k řešení různých vědeckotechnických úloh. Tato koordinace se děje v rámci našeho státu i v rámci RVHP. Jedním z pozitivních výsledků je vytvoření velkého množství balíků programů a zvýšení jejich podílu na vypracovávaném matematickém zabezpečení samočinných počítačů.

Ovšem existují i mnohé nevyřešené problémy. Například nejsou zcela vyjasněny otázky příjmu i předávání balíků a ochrany autorských práv i materiálního zainteresování jejich tvůrců. V řešení těchto problémů se u nás projevuje jistá zaostalost ve srovnání s rozvinutými západními zeměmi. „Průmysl“ balíků je v mnohých z nich na značně vysoké úrovni. Balíky programů se staly normálním zbožím na trhu nových technologií. Je ještě jeden negativní faktor – tendence k vytváření samoučelných balíků. Nelze zapomenout, že jejich vypracovávání má smysl až v dostatečně pokročilém stadiu počítačového modelu, kdy je přesně formulována třída řešených úkolů a jsou k dispozici odpovídající algoritmy. V opačném případě se balíky ukazují jako málo efektivní. Balíky aplikačních programů jsou jedním ze základů technologie matematické informatiky, otázky jejich rozvoje sledují všichni zainteresovaní odborníci a organizace a je třeba, aby byly řízeny zkušenými experty.

*) Mikroelektronika přináší zrychlení rozvoje hardware (konstrukčních prvků výrobní techniky), podstatně méně se dotýká software (programových produktů) a z hlediska matematické informatiky je počítačové modelování prakticky jen softwarovou záležitostí. Nelze tedy od samotného rozvoje mikroelektroniky očekávat podstatné ulehčení práce v konkrétních projektech počítačového modelování. (Pozn. překl.)

Před naší aplikovanou matematikou stojí značně obtížné vědecké i organizační úkoly. Jsou ovšem známy i efektivní cesty k jejich řešení. Aplikovaná matematika je schopna si udržet své důstojné místo a upevnit své pozice ve vědeckotechnické revoluci.

Podle představ mých vlastních a mých kolegů se bude aplikovaná matematika v blízké budoucnosti zabývat neodkladnými úkoly naší doby, bude disponovat širokou armádou kvalifikovaných pracovníků, bude široce i dovedně používat počítačové modelování a bude zasahovat do všech nových oblastí výzkumu procesů živé i neživé přírody a do průmyslové výroby.

Na žádost redakce PMFA přeložil Marek Malík

O úloze fyziků v národním hospodářství

Armin Delong, Brno

Projev akademika Armina Delonga na konferenci „Fyzika a fyzikové v průmyslu“, Brno, 9. – 10. října 1984.

Fyzika, fyzikální myšlení, fyzikální metody — to jsou pojmy, které mají svoji domácí půdu především na přírodovědeckých fakultách. Alespoň tak je to pevně zakotveno v představách naší veřejnosti, ale i mnozí odborníci v průmyslu jsou stejného názoru. V čem je třeba hledat příčiny tohoto rozdílného nazírání na úlohu fyzika u nás a v některých jiných zemích, kde je fyzik považován za neodmyslitelnou profesi v řadě průmyslových odvětví, především ve vývoji a výzkumu?

Důvodů je patrně několik. Jeden z nich má zřejmě historické kořeny. S rozvojem techniky je u nás od samých počátků spojena profese inženýra. V povědomí naší veřejnosti byl vždy inženýr nositelem technického pokroku, hlavním aktérem rozvoje průmyslu, stavitelem obdivuhodných technických děl. Úlohu fyzika spatřovala veřejnost především v jeho učitelském poslání. Tak tomu bylo především v období mezi oběma světovými válkami. Druhá světová válka byla mohutným impulsem fyzikálnímu výzkumu v zemích spojenců i v nacistickém Německu. Také v poválečném období pokračoval fyzikální výzkum ve stále větší míře i v oblasti průmyslu. U nás se přístup k fyzikálnímu výzkumu nezměnil, naopak citelně nepříznivě se projevila teze o poslání vysokých škol jako výchovných institucí a vědecký výzkum se zkoncentroval do ČSAV. Tam se sice výzkum zaměřil na fyziku pevných látek (kromě účasti na „velké“ fyzice elementárních částic), což byla orientace bezesporu progresivní, avšak bez většího ohlasu v aplikační sféře. Tak se stalo, že náš fyzikální výzkum významněji nezasáhl do bouřlivého rozvoje zejména takových oblastí, ve kterých přestala hrát rozhodující roli konstrukční problematika vystřídaná vysoce náročnou technologií, vycházející z výzkumu v oblasti fyziky pevných látek, fyziky plazmatu a dalších oblastí fyziky.