

Ivo Babuška; J. Tinsley Oden
Kam kráčí výpočtová mechanika?

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 48 (2003), No. 2, 152–158

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/141172>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2003

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>

Kam kráčí výpočtová mechanika?

Ivo Babuška a J. Tinsley Oden, Austin

1. Úvod

Mechanika — obor aplikované vědy, který se zabývá studiem pohybu, deformace a tečení materiálů, pevných těles a tekutin, na něž působí síly — je už po více než dvě století hlavním činitelem technického pokroku průmyslového světa. Díky příchodu elektronických počítačů se v mechanice během posledních čtyř desetiletí udála dramatická, kvalitativní změna. Počítače totiž umožnily přetvořit čistě kvalitativní teoretickou mechaniku v nepostradatelný nástroj užívaný v nespočetných technických a vědeckých aplikacích.

Rychlý rozvoj počítačů vedl v informatice ke vzniku nového oboru, který se zabývá především samotným počítačem. Naproti tomu výpočtová matematika¹⁾ zahrnuje odvětví zabývající se vývojem technik matematického modelování, matematickou analýzou, numerickými algoritmy, počítačovými programy a též konkrétními aplikacemi ve vědě a technice. Výpočtová mechanika je součástí výpočtové matematiky. Hranice výpočtové mechaniky se rychle rozšiřují, neboť klasická i moderní fyzika, biologie a chemie jí nabízejí nový prostor pro uplatnění.

Abychom v tomto oboru mohli předpovídat trendy, musíme si nejprve plně uvědomit rychlé a pozoruhodné pokroky v počítačové technice. Použijeme-li, jak to bývalo zhruba před deseti lety zvykem, VAX-11/780²⁾ jako jednotku pro srovnávání parametrů (1 MB vnitřní paměti, 0,5 GB diskové paměti, 1 CPU s rychlostí řádově

¹⁾ *Poznámka překladatele:* Český termín pro *computational science* sice dosud není pevně ustálen, ale překlad „výpočtová matematika“ bývá častý. S více variantami se lze setkat při hledání náhrady za *computational model* — počítačový, výpočtový či výpočetní model. Za terminologické rady děkuji doc. RNDr. P. Příkrylovi, CSc., z MÚ AV ČR.

²⁾ *Poznámka překladatele:* Jde o počítač firmy Digital Equipment Corporation (DEC), proslavené konstrukcí malých sálových šestnáctibitových počítačů řady PDP-11, jejichž klony se vyráběly i v bývalých socialistických zemích. Na popularitu PDP navázala modernější a výkonnější dvaatřicetibitová řada VAX. Díky svému značnému rozšíření bývaly počítače VAX brány jako měřítko výkonnosti. Firma DEC se stala druhým největším výrobcem výpočetní techniky (po IBM), avšak nezachytila nástup pracovních stanic ani osobních počítačů a po letech zápasu s úpadkem byla pohlcena společností Compaq.

Prof. IVO BABUŠKA (1926) a prof. J. TINSLEY ODEN (1936) pracují v Texas Institute for Computational and Applied Mathematics (TICAM), The University of Texas at Austin, TX 78712, USA.

Z anglického originálu *Computational Mechanics: Where Is It Going?* se svolením autorů volně přeložil JAN CHLEBOUN.

0,1 megaflops³⁾), pak v roce 1992 měl počítač IBM RS580⁴⁾ vnitřní paměti 64krát více, řádově 10krát větší diskovou paměť a rychlost jeho CPU byla 1000krát vyšší. To bylo zvýšení výkonu během pouhých tří let.⁵⁾ V roce 1997 měl počítač SGI⁶⁾ Power Challenge už 1000krát větší paměť než VAX, 150krát více diskové paměti, 6 procesorových jednotek, které dohromady představovaly teoretickou rychlost 18 000krát vyšší, než měl VAX; firma IBM nedávno oznámila, že její počítač Blue Gene dosáhne výkonu zhruba 10^{15} aritmetických operací za sekundu.⁷⁾ Před výpočtovou mechanikou stojí velký úkol — vyvinout matematické metody, algoritmy a datové struktury, které by dokázaly náležitě využít pokrok ve výpočetní technice. A nejen to, rozumné a efektivní použití nových možností bude stejně důležité jako samotný vývoj výpočetních nástrojů. Jak říká staré pořekadlo: „Nestačí mít velké kladivo, také je třeba trefit hřebík na hlavičku.“

Pokrok jak v informatice, tak ve výpočtové matematice vedl v mnoha odvětvích mechaniky ke zvýšení důvěry v počítačové modely používané k předpovědím událostí v přírodě a k navrhování technických děl. Díky počítačům je dnes možné vyhnout se mnoha drahým pokusům, vyvíjet nové materiály, analyzovat víceúrovňové jevy a provádět důležité prediktivní výpočty v technice, v biologii a v lékařských aplikacích, v přírodních systémech, v chování oceánů, řek a jejich ústí, v interakci mezi vodou, pevninou a atmosférou, jakož i v mnoha dalších oblastech. Přesto je výpočtová mechanika v relativně mladém stadiu vývoje. Můžeme ještě očekávat ohromující pokrok. Ptejme se tedy, co v tomto oboru v budoucnosti čekáme.

2. Matematické modelování

V prvé řadě je třeba vysoce ocenit, že výpočtová mechanika je vnitřně propojena s matematikou a s matematickými modely. Teoretická mechanika zahrnuje teorie, jež jsou sdělovány řečí matematiky: například parciálními diferenciálními rovnicemi,

³⁾ *Poznámka překladatele:* CPU značí centrální procesorovou jednotku a megaflops znamená milion aritmetických operací (obvykle násobení a sčítání) v pohyblivé řádové čáře za sekundu. Zájemci o srovnávání výpočetní rychlosti počítačů mohou navštívit internetovou stránku <http://www.netlib.org/performance/>. Mj. tam zjistí, že VAX-11/780 počítal zhruba tak rychle jako osobní počítač z roku 1987 s procesorem Intel 386, s matematickým koprocesorem 387 a s taktovací frekvencí 20 MHz. (Pro srovnání, počítač s procesorem Pentium 4 (2,53 GHz) vypočítal stejnou úlohu cca 9000krát rychleji.) Sluší se však připomenout, že VAX byl víceuživatelský počítač, takže při současném běhu více úloh jeho praktický výkon, jak ho pozorovali jednotliví uživatelé, zpravidla neklesal dramaticky.

⁴⁾ *Poznámka překladatele:* Jednoprocesorová pracovní stanice RS/6000 Model 580 společnosti International Business Machines.

⁵⁾ *Poznámka překladatele:* Časový údaj je nepřesný. VAX-11/780 byl představen v roce 1977, viz např. http://www.compaq.com/alphaserver/vax/wax_now.html.

⁶⁾ *Poznámka překladatele:* Silicon Graphics, Inc., kalifornská společnost založená v roce 1982.

⁷⁾ *Poznámka překladatele:* Projekt za 100 milionů dolarů má být dokončen do roku 2005. Viz <http://researchweb.watson.ibm.com/bluegene/>.

obyčejnými diferenciálními rovnicemi nebo integrálními rovnicemi. Jejich implementace těžší ze základních výsledků algebry, kombinatorické a diskrétní matematiky, geometrie a topologie. Aby moderní výpočetní metody mohly využít bohatství těchto matematických struktur, je matematicky formulovaný problém přirozenou diskretizací transformován na úlohu, která může být zpracována moderními číslicovými zařízeními. Samotný matematický model obsahuje abstrakce fyzikálních zákonů spolu s různými zjednodušeními a informacemi, jež slouží k popsání zkoumaného systému. Matematický problém smíme též považovat za matematický model, protože transformuje fyzikální pojmy a vztahy do souboru matematických výrazů a dat.

Typickou ukázkou může být například nějaký jev charakterizovaný lineární parciální diferenciální rovnicí definovanou na jisté oblasti D , a dále jistými okrajovými podmínkami a zdrojovými členy na „pravé straně“. Při přechodu od matematického modelu k modelu výpočtovému musíme do vstupních dat zahrnout popis oblasti D , koeficienty rovnice, údaje o zdrojích a okrajové nebo počáteční podmínky. V konkrétních případech může být oblast D určena údaji ze systému CAD⁸⁾ nebo daty ze zobrazovacího zařízení⁹⁾ a koeficienty jsou odvozeny z vlastností materiálu, přičemž mohou být určeny experimentálně nebo z jiných typů modelů. Okrajové podmínky obvykle bývají idealizovaným a zjednodušeným popisem interakce mezi hranicí oblasti, na níž zkoumáme daný jev, a okolím. Interakce, kterou při analýze jevu redukuje na abstraktní matematické termíny. V aplikacích je cílem získat potřebná data přímo spjatá s matematickým řešením problému. Tyto vztahy jsou často dány lineárními a nelineárními funkcionaly.¹⁰⁾ Výsledné hodnoty pak jsou podkladem pro technická rozhodnutí a vědecké předpovědi.

Bývalo zvykem předpokládat, že všechny údaje vstupující do zadání problému jsou známy přesně, což samozřejmě nikdy není splněno. Definici a používání jakéhokoli modelu, matematického i počítačového, provází jistá dávka nejistoty. Fyzikální detaily se při matematické abstrakci vždy ztratí a nejistoty jsou obsaženy ve vstupech i výstupech, ve zdrojích, v okrajových podmínkách, v charakterizaci materiálů, a dokonce i v interpretaci kvalitativních vlastností získaných řešení. Jestliže má role počítačové simulace ve výpočtové mechanice dále růst a významně ovlivňovat vědu a techniku, pak bude naprosto nezbytné stanovit kvantitativní odhady vlivu nejistot v modelování. Také odolnost samotného modelu je nutné brát v úvahu — jak je citlivý nebo necitlivý na nejistotu ve vstupních údajích. Jinak totiž není možné vypočteným předpovědím přisuzovat praktický význam.

⁸⁾ *Poznámka překladatele:* CAD znamená Computer Aided Design, navrhování pomocí počítače. Myslí se tím především geometrický návrh (konstrukce, dílu, součástky). Výstupy z CAD mohou posloužit jako část vstupů pro počítačové modely, programování obráběcích linek apod.

⁹⁾ *Poznámka překladatele:* Kupříkladu z tomografu, rentgenu aj.

¹⁰⁾ *Poznámka překladatele:* Například řešením problému pružnosti standardně bývají funkce udávající posunutí jednotlivých bodů tělesa při působení zadaných sil. V praxi důležitější než posunutí je napětí v materiálu. To se následně vypočítá z posunutí a z materiálových parametrů.

Důležitou oblastí, na niž dnes počítačové simulace mají dopad, je studium heterogenních materiálů, tj. materiálů, tekutin nebo pevných těles tvořených heterogenní směsí složek. Typický matematický model v těchto případech obsahuje diferenciální rovnice s „hrubými“ koeficienty. Gradients řešení a též odvozené toky či napětí jsou extrémně citlivé na malé změny těchto koeficientů, zatímco průměry přes (pod)oblast k nim mohou být víceméně necitlivé. Tím se dostáváme k tomu, že opakovatelnost odpovědi systému na podněty musí být podchycena matematicky při charakterizaci modelu a jeho základní stability vzhledem k rozumným změnám vstupů.

Ve vývoji matematických modelů pro výpočtovou mechaniku vyvolává rostoucí zájem i to, jak je definována oblast D tvořící součást vstupních dat. Předpokládejme, že oblast byla získána digitální zobrazovací metodou, která nám tvar fyzického vzorku převádí na oblast „pixelového“ charakteru. Jestliže fyzikální problémy obsahují mikrostrukturu kruhových inkluzí, její pixelová reprezentace samozřejmě nebude vykazovat dokonalé kruhy. Předpokládejme dále, že se zajímáme o hodnotu řešení ve středu kruhu. Nechť D_p značí pixelovou oblast a u je řešení úlohy definované na D . Pak je pro jisté okrajové podmínky možné ukázat, že¹¹⁾ $|u(0) - u_p(0)|/|u(0)|$ může být řádově 20 % pro libovolně malé pixely. Vystává tedy problém, jak zhladit pixelovou oblast, případně zda by vhodné přeformulování okrajových podmínek odstranilo tento paradox. Druhá cesta je schůdná — a tady opět vidíme základní důležitost matematické analýzy. Ta se nejen stává neodmyslitelnou součástí procesu konstrukce modelu, ale také nezbytným nástrojem pro určování geometrických vlastností modelu a jejich citlivosti ke vstupním údajům i pro celkové porozumění modelu.

Je též třeba smířit se s faktem, že matematický model nikdy nemůže být zcela ztotožněn se skutečností. To je důsledek rozličných zjednodušení a nejistot tkvících v samotném modelování. Je však možné sestavovat různě složité modely, a tím vytvořit hierarchii modelů. Pak můžeme učinit čistě matematický předpoklad, že ta nejvyšší úroveň složitosti v celé hierarchii je ztotožnitelná se skutečností a že každý jiný model v hierarchii je aproximace, jejíž chybu lze odhadnout. Tím vznikne matematický základ pro výběr vhodných modelů z velké třídy možných abstrakcí fyzikálních událostí.

Ve výpočtové mechanice se všeobecně uznává, že zcela přesná matematická analýza velmi složitých problémů může být nesmírně komplikovaná, ne-li nemožná. Ve výpočtové mechanice se tedy s porozuměním přijímá, že numerické experimenty mají významnou roli a že se používají pro získání vhledu do problémů. Tato skutečnost klade obrovské nároky na náležité používání analýzy založené na výpočtech. Pokud numerické experimenty nejsou dobře navrženy a nejsou podrobně analyzovány, snadno mohou vzniknout scestné závěry. Výpočtová matematika je proto doplňkem matematické analýzy a naopak. Matematiku nenahradí, ale určitě změní metodiku matematiky a doplní ji v důležitých aplikacích. Počítače se budou navíc používat k vytváření matematicky formulovaných domněnek i k testování domněnek v počítačově vedených důkazech, což je sice poněkud diskutabilní aplikace, nicméně se domníváme, že ji bude matematická komunita stále více přijímat.

¹¹⁾ *Poznámka překladatele:* Samozřejmě se předpokládá, že $u(0) \neq 0$.

Myslíme si, že v čisté matematice bude výpočtová matematika šířeji a vážněji akceptována a že to dnešní čistou matematiku přivede blíže k matematice aplikované a k počítání.

Věříme, že jedno je jasné: mnoho z toho, co je v dnešní aplikované a výpočtové mechanice intuitivní a heuristické, bude postupně ustupovat silnějším myšlenkám, metodám a přístupům. Počítačové simulace, posíleny dalšími pokroky výpočtové mechaniky, budou používány jako vodítko tam, kde intuice selhává nebo nemůže poradit. Jednotková cena výpočetních operací už po desetiletí klesá¹²⁾, zatímco stále stoupají náklady na pracovníky zabývající se formulací matematického problému, vytvářením výpočtového modelu či vývojem software a jeho implementací. To nás vede k očekávání, že uvidíme významný pokrok v rozšiřování matematických algoritmů o automatizované metody, adaptivitu a automatické rozhodování. Tyto postupy budou aplikovány na širší třídu jevů, zejména na jevy silně nelineární, jež pozorujeme jak v deterministických, tak stochastických úlohách. V budoucnu se budou používat daleko složitější a preciznější modely včetně těch, které budou přihlížet k mikromechanickým vlastnostem tekutin nebo vlastnostem materiálu na různých rozměrových úrovních a které nakonec z optimalizace učiní součást navrhování a výroby.

3. Numerická matematika ve výpočtové matematice

Pro mnoho uživatelů metod a postupů výpočtové mechaniky je hlavním důkazem správnosti srovnání vypočítaných hodnot s pozorováním v laboratoři nebo v přírodě. Tato srovnání jsou provázena chybami. Chybou způsobenou výběrem konkrétního matematického modelu, chybou v datech vstupujících do modelu a chybou numerické aproximace. Abychom je od sebe dokázali oddělit, musíme vědět, že numerické chyby jsou měřitelné a odlišné od chyb matematického modelu. V budoucnu bude nezbytné chyby ovlivňovat, tj. s jistou přesností je odhadnout a adaptivně provádět změny v modelu i jeho numerické aproximaci tak, aby byla posílena přesvědčivost a spolehlivost výpočtů. K dosažení tohoto cíle je nutné se zabývat těmito tématy:

A. Se vzrůstajícím výpočetním úsilím musíme být schopni, aspoň teoreticky, vyřešit problém přesně. Jinými slovy, vypočtené hodnoty by se neměly podstatně měnit, jestliže je naše úsilí dostatečně velké. Tento požadavek má vztah ke konvergenci, pro niž je sice žádoucí přesný matematický důkaz, avšak numerické testy mnohdy zůstávají tím hlavním nástrojem. Znovu zdůrazňujeme, že je nezbytné numerické testy provádět s rozmyslem a jejich výsledky pečlivě vyhodnocovat.

¹²⁾ *Poznámka překladatele:* Výstižný graf nabízí str. 24 knihy R. Kurzweila *The Age of Spiritual Machines*, Penguin Books, New York 2000. Zobrazuje počet operací za sekundu vztahovaný k tisíci dolarů prodejní ceny počítače. V roce 1958 to bylo řádově 10 operací, o čtyřicet let později 10^8 operací.

B. Výpočet musí být spolehlivý a na základě aposteriorního¹³⁾ odhadu chyby by se měla určit tolerance, s níž je výsledek vypočten. Odhad musí mít vztah k veličinám, kvůli nimž výpočet provádíme, nebo k normě, která je pro danou aplikaci relevantní. Odhad chyby by měl být garantovaný¹⁴⁾ a také by měl být dostupný interval spolehlivosti, což je interval daný mezemi, jež jsou odvozeny z numerického řešení a ze spočtené tolerance a mezi nimiž přesná hodnota veličiny (či řešení) leží.

C. Podstatné je vytvořit takový adaptivní postup, který povede k řešení v předem zadaném pásmu tolerance a též velmi významně sníží množství lidského i výpočetního úsilí vynakládaného na řešení rozsáhlých problémů. Tady se adaptivita týká nejen chyby numerické aproximace, nýbrž i výběru matematického modelu.

4. Kam jdeme?

Jestliže přijmeme, že polem působnosti mechaniky vsutku je studium chování systémů a těles za působení sil, pak se všechny typy takových systémů, s nimiž se ve vědě setkáváme, stávají její kořisti: subatomové systémy, dynamika systémů molekul a dislokací, biologické systémy, kvantové efekty, chemická kinetika, geologické systémy, systémy v astronomii a astrofyzice, chování atmosféry a oceánů a mnohé další. Na začátku nového tisíciletí pozorujeme, že vědecké základy mnoha z těchto rozdílných disciplín už pozoruhodně vypsely. Témata jsou zralá pro aplikace, matematickou analýzu, počítačové modelování a simulaci orientovanou na predikci. To je nový prostor pro výpočtovou mechaniku.

Stojí před ní úctyhodné úkoly. Nejdůležitější bude vývoj přesné a účelné matematické kostry vhodné pro popis užitečných modelů takových jevů. V tom dodnes přetrvává mnoho empirismu a heuristiky, což musí ustoupit přesným definicím rozsahu, spolehlivosti a struktury velkého souboru matematických modelů. V opačném případě transformace matematických modelů v užitečné výpočetní nástroje nebude o nic spolehlivější než holywoodská animace.

Za druhé, obrovský rozsah časových a prostorových měřítek, v nichž se mnohé důležité jevy odehrávají, zvládneme jen novými metodami a zařízeními. Musíme si vytvořit jasný obraz toho, která měřítka jsou pro určité události důležitá a jak postihnout jevy určené událostmi odehrávajícími se v rozmanitých měřítkách. Pokrok v tomto směru bude hmatatelný, až se objeví konkrétní postupy, které přesně odhalí omezení kterékoli třídy modelů a ukáží způsob, jakým by se tyto třídy měly rozšířit nebo redukovat, aby zachytily ty rysy chování systému, o něž se zajímáme.

¹³⁾ *Poznámka překladatele:* Apriorní odhad chyby se na základě teoretického rozboru numerické metody stanovuje před výpočtem. Indikuje, jak metoda řádově aproximuje přesné řešení. Protože však obsahuje řadu neznámých konstant a (nezřídka) hrubých odhadů, pro stanovení skutečné chyby je nepoužitelný. Aposteriorní odhad naproti tomu využívá i vypočtené numerické řešení a jisté pomocné výpočty k prakticky použitelnému odhadu rozdílu mezi (neznámým) přesným řešením a jeho numerickým přiblížením.

¹⁴⁾ *Poznámka překladatele:* Ve smyslu: „Chyba (v jisté normě) je určitě nanejvýš rovna . . .“

Přínos nové výpočtové mechaniky by mohl být ohromný: nové materiály optimalizované pro různé použití, nové léky, chemikálie a chemické technologie, prediktivní operační postupy založené na osobních výpočtových modelech přizpůsobených jednotlivým pacientům, spolehlivé předpovědi počasí, porozumění jevům v galaxiích nebo tokům energie a látek v přírodě, nová subatomová zařízení s tisíci aplikacemi, a to vše s mírou spolehlivosti, která by před pouhým desetiletím byla nepředstavitelná.

Nakonec zdůrazněme, že nás čeká mnoho nové matematické práce. Postup vpřed se neobejde bez podstatného pokroku v matematickém modelování, numerické analýze, počítačích a informatice, zkrátka ve všech součástech nové výpočtové mechaniky.

Spojité, diskrétní a ... všechno ostatní

Gustave Choquet, Paříž

1. Pomalý vývoj

Spojité a diskrétní jsou dvě důležitá témata vědeckého myšlení. Jejich existence nepřestávala zneklidňovat mysl matematiků, fyziků a filozofů. Chtěl bych se zde pokusit o upřesnění jejich místa v moderní vědě a načrtnout studii jejich vzájemných vztahů.

Tato slova, *spojité* a *diskrétní*, evokují mnoho dalších klíčových slov a příbuzných pojmů: *spojitost*, *nespojitosť*, *nekonečno aktuální* či *potenciální*, *Achilles* a *želva*, *duálita*, *vlny – částice*, *fuzzy množiny* atd. ...

Tato témata se pozvolna obohacovala počínaje od Pythagora, Eleatů a Aristotela. A přece jejich studium nešlo kupředu po celá staletí, jako kdyby Aristotelova autorita brzdila tvůrčí elán patrný v Iónské škole, oplývající matematiky a astronomy, jako byli Thalés z Milétu a Aristarchos ze Samu.

Je pikantní říci, že kdyby Řekové Periklova století znali z cantorovského světa třeba jen krátkou definici ekvipotence dvou množin prostřednictvím bijekce, celá historie matematiky a filozofie by byla jiná.

Myslím si tedy, že bude zajímavé zastavit se u příčiny tohoto dlouhého spánku. Shledávám ji v konzervatismu lidského myšlení: člověk má sklon považovat to, co se

Le continu, le discret, et ... tout le reste. Le labyrinthe du continu (Colloque de Cerisy-la-Salle, 1990), eds. SALANKIS, J.-M., SINACEUR, H., Springer-Verlag, Paris 1992.

© Springer-Verlag 1992

Přeložil ZBYNĚK ŠÍR.