УДК 519; 533.6

НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В. М. Ковеня

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090 Новосибирск

Сформулированы основные проблемы и тенденции развития математического моделирования — нового научного направления в исследовании различных процессов и явлений. Анализ состояния и перспектив развития проведен на примере задач механики сплошной среды. Основное внимание уделено двум этапам моделирования — выбору физико-математических моделей механики сплошной среды и численным алгоритмам их решения.

Введение. Математическое моделирование как новый способ исследования и получения новых знаний сформировалось в 70-х гг. XX в. на основе широкого применения математических методов при решении теоретических и практических задач естествознания. Его создание и развитие обусловлено появлением электронно-вычислительных машин, способных производить арифметические и логические вычисления со скоростью, недоступной для человека. Необходимость решения все более сложных задач науки, техники и народного хозяйства потребовала разработки и обоснования математических моделей, отражающих основные закономерности исследуемых явлений, и создания экономичных численных алгоритмов их решения. Эффективная реализация этих алгоритмов в свою очередь не только потребовала разработки и создания новых ЭВМ, но и стимулировала исследования по созданию новых языков программирования, операционных систем и систем поддержки программного обеспечения, а также разработку новых подходов в программировании и информационных технологиях. Все это позволило перейти от использования ЭВМ как скоростного вычислителя к системе моделирования, включающей весь процесс от разработки математических моделей, численных алгоритмов, программирования до создания комплексов и пакетов программ для решения классов задач, анализа результатов, вывода, хранения, что является содержанием нового научного направления — математического моделирования [1–11].

С возникновением нового направления исследований появились проблемы, от решения которых зависит его развитие. Математические модели и алгоритмы, программы и комплексы программ, ЭВМ и системы поддержки для решения задач являются элементами моделирования. Их роль и место могут быть правильно оценены лишь во всей цепочке моделирования, которую назовем технологической (см. [11]). Под технологической цепочкой моделирования будем понимать совокупность ее элементов, выполняемых в определенной последовательности и составляющих полный цикл. Разумеется, для различных областей исследования эти элементы могут различаться, поэтому в качестве основы технологической цепочки должны быть выбраны общие для всех областей моделирования элементы. В соответствии с современными представлениями процесс моделирования может быть представлен в виде следующей последовательности: исследуемое явление — математические модели — численные алгоритмы — программирование — ЭВМ — вычисления и их анализ — обработка и хранение результатов, дополняющей известную триаду математического моделирования модель — алгоритм — программа [2, 4, 11]. Все элементы технологической цепочки, очевидно, взаимосвязаны, и эта связь нелинейна, а изменение одного из ее элементов может привести к изменению не только последующих, но и предыдущих элементов. До начала моделирования исследователь явно или неявно проводит анализ всей цепочки моделирования исходя из современных представлений об исследуемом явлении или процессе, наличия ресурсов ЭВМ и ее возможностей, наличия численных алгоритмов и т. д. Конечно, для некоторых изучаемых явлений и классов решаемых задач отдельные элементы цепочки могут быть опущены. В качестве примера приведем известное представление Н. Н. Яненко о разностной схеме (численном алгоритме) как математической модели для описания физического явления. Создание более полных математических моделей, способных адекватно описывать более сложные исследуемые процессы, и разработка более точных и эффективных численных алгоритмов приводили к необходимости создания ЭВМ все большей производительности. Это могло быть достигнуто не только за счет совершенствования элементной базы, но и главным образом за счет новых архитектур ЭВМ, использующих принципы многопроцессорности и параллельности вычислений. В свою очередь эти архитектуры накладывают определенные требования на численные алгоритмы, большинство из которых созданы в эпоху однопроцессорных ЭВМ, в которых вычисления проводились последовательно. Новые архитектуры ЭВМ требуют создания новых численных алгоритмов и пересмотра существующих численных методов с целью их адаптации к этим архитектурам.

В настоящее время можно утверждать, что математическое моделирование наряду с физическим и натурным экспериментами является основным способом исследования и получения новых знаний в различных областях естествознания. Можно ожидать, что его роль в дальнейшем возрастет, но оно не заменит физический или натурный эксперимент, так как опыт всегда остается основой исследования. Следует ожидать сближения различных форм исследования, дополняющих друг друга. Активное использование математического моделирования в различных областях естествознания и человеческой деятельности обусловлено многими факторами, основными из которых являются следующие:

— усложнение класса исследуемых задач, для изучения которых необходимо создание новых дорогостоящих экспериментальных установок или модельных объектов (в ряде случаев численное моделирование этих задач может быть получено при меньших финансовых затратах);

— большие энергетические и финансовые затраты на обслуживание экспериментальных установок и объектов;

— необходимость решения экологических, социальных и других проблем;

— невозможность проведения физического (химического, экономического и т. д.) или натурного моделирования в ряде областей исследования (в этом случае математическое моделирование является единственно возможным).

К указанным факторам следует добавить возможность сокращения сроков исследования и получения результатов, а также возможность их многократного и быстрого повторения или уточнения, хранения и т. д. Развитие математического моделирования приводит к созданию автоматизированных систем для управления производством, что позволит резко увеличить производительность труда и избежать влияния субъективного “человеческого” фактора при принятии решений. Таким образом, математическое моделирование становится основным способом исследования и получения новых знаний. В то же время результаты математического моделирования находят широкое применение в производстве и других областях человеческой деятельности (например, при создании систем автоматического проектирования, экспертных систем и т. д. [12]). В данной работе рассматриваются некоторые тенденции развития математического моделирования. Поскольку охватить все области его применения невозможно, ниже сделан акцент на задачах механики сплошной среды. В этой области исследования математическое моделирование получило наибольшее распространение как в силу невозможности получения решений на основе других подходов, так и в силу важности этого класса задач для развития производства (см., например, [1–12]). Как отмечено выше, эффективность математического моделирования может быть правильно оценена при рассмотрении всей технологической цепочки. Поэтому остановимся на анализе состояния и развития отдельных ее элементов и их взаимодействия. Основное внимание уделяется выбору моделей и численных алгоритмов.

1. Физико-математические модели. Для задач механики сплошных сред в наиболее полной постановке физико-математические модели могут быть описаны интегральными законами сохранения

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V W_0\,dV + \oint\limits_S W\,ds = \int\limits_V F\,dV, \qquad (1.1)$$

выражающими связь между изменением во времени в замкнутом объеме V некоторых величин (потоков) и их изменением при переходе через границы S, а также взаимодействие потоков с внешними источниками или стоками. Интегральные законы сохранения (например, массы, импульсов и энергии для моделей сплошной среды) являются наиболее общей формой описания движения сред и справедливы как для непрерывных, так и для разрывных решений. Наряду с интегральной формой используется их дифференциальное представление

$$\frac{\partial W_0}{\partial t} + \operatorname{div} W = F,$$

полученное из (1.1), но справедливое лишь для непрерывных решений.

Многообразие и многопараметричность исследуемых задач и их математических постановок, разномасштабность процессов приводят к цепочке физико-математических моделей, каждая из которых получена при определенных предположениях о характере изучаемого явления и описывает основные его закономерности. Особенностью такого подхода является и многообразие уравнений, описывающих эти модели. Полученные уравнения могут быть уравнениями различного типа (гиперболическими, параболическими, эллиптическими или уравнениями переменного типа), что приводит к различным постановкам начальных и краевых задач. Более того, при исследовании одного класса задач тип уравнений может меняться в зависимости от характера решения. Например, стационарные уравнения газовой динамики являются уравнениями эллиптического типа для дозвуковых скоростей и гиперболического для сверхзвуковых, т. е. в отдельных подобластях расчетной области необходимо решать уравнения различного типа, что накладывает дополнительные требования на применяемые численные методы.

Большинство процессов в механике жидкости и газа являются нелинейными и эволюционными, и как следствие эти же свойства присущи описываемым их системам уравнений. Свойства таких уравнений изучены недостаточно, для большинства задач не доказаны теоремы существования и единственности, более того, их решения могут быть неединственными и разрывными даже при гладких начальных данных (см. [10]). Переход к многомерным задачам и усложнение расчетных областей (рассмотрение реальных геометрий) вносит дополнительные трудности в их постановку. При отсутствии строгих доказательств существования и единственности решений всегда остается открытым вопрос о соответствии физико-математической модели исследуемому явлению. При недостаточной информации об исследуемом процессе возникает необходимость рассмотрения различных моделей, учитывающих основные закономерности изучаемого явления для различных диапазонов основных параметров. Таким образом, выбор и формулировка физико-математических моделей становится многопараметрической задачей, решение которой