

Академик

А. А. САМАРСКИЙ:

«Вести широкую пропаганду идей
и методов вычислительного
эксперимента»

— Последние десятилетия характеризуются бурным развитием вычислительной техники и численных методов. В науке возникло новое направление, называемое условно «вычислительный эксперимент». Александр Андреевич, расскажите, пожалуйста, об особенностях этого направления, отличающих его от традиционных методов математической физики.

— О математическом моделировании и вычислительном эксперименте я уже писал на страницах вашего журнала¹. Вычислительный эксперимент (ВЭ) в настоящее время становится основным математическим средством изучения крупных научно-технических проблем. Это — новая методология и новая технология теоретического исследования, опирающаяся на использование ЭВМ и методов вычислительной математики. Применение численных методов сделало возможным решение таких крупных задач математической физики, о которых ранее нельзя было и мечтать. Фактически возникла новая наука — вычислительная физика, которая занимается вопросами численного моделирования сложных физических процессов. Ее инструментом является ВЭ, который объединяет ряд проблем: получение математических моделей, создание вычислительных методов и алгоритмов, программирование, проведение численных расчетов, сопоставление их с данными реальных экспериментов.

Последовательность перечисленных этапов составляет один цикл вычислительного эксперимента, который при необходимости может быть повторен нужное число раз с

требуемыми уточнениями и дополнениями модели, численных методов и т. д.

Если все указанные этапы ВЭ изобразить в виде кружочков, размещенных равномерно на некоторой окружности, то в центр ее следует поместить «объект» — физическую задачу во всей ее сложности и грандиозности. Для этой задачи и строится математическая модель, выбираются численные методы, проводятся расчеты. Разумеется, сказанное о вычислительном эксперименте в физике относится ко всем областям науки и техники, в которых существуют и используются математические модели.

— Приведите, пожалуйста, примеры решения конкретных задач с помощью вычислительного эксперимента.

— Широко известна такая важная задача физики и техники, как управляемый термоядерный синтез (УТС). Эта общая проблема имеет ряд направлений, каждое из которых представляет цепь задач — физических, математических и инженерных. Изучение физики термоядерной плазмы, проектирование физических экспериментов и стендовых установок, диагностика плазмы проводятся на основе широкого использования ВЭ. Особенно эффективным оказался ВЭ при изучении проблемы лазерного термоядерного синтеза (ЛТС); на основе ВЭ были выяснены условия реализации ЛТС и предложены конструкции мишеней с большим коэффициентом усиления.

Ярким примером комплексного (физического и математического) исследования физической проблемы методом ВЭ является изучение и обнаружение (сначала в вычислительном, а затем в физическом эксперименте) эффекта T -слоя. О нем

¹ См.: Самарский А. А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. — Вестник АН СССР, 1979, № 5.

я уже рассказывал на страницах вашего журнала.

Отмечу одно обязательное свойство такого комплексного исследования: качество всех этапов ВЭ должно быть высоким. Так как вычисления для каждой фиксированной модели проводятся многократно, при разных значениях определяющих параметров задачи, то особую роль играет качество алгоритмов и программ, от которых зависит эффективность использования ЭВМ.

«Обслуживание» серьезного ВЭ требует, как правило, работы целого коллектива разносторонних и знающих специалистов.

— Каковы способы внедрения в практику такого эффективного инструмента исследований, как вычислительная программа (Всесоюзный фонд алгоритмов и программ, пакетная система)?

— Сначала скажу о Всесоюзном фонде программ. Безусловно, централизация и накопление программного материала — рабочего инструмента ВЭ — являются полезными. Существенно, что программы, поступающие в такой фонд (в частности, он существует при ВЦ АН СССР), сопровождаются определенной ГОСТом подробной документацией, что приравнивается к публикации. Эти документы позволяют исследователю найти и использовать нужную ему программу.

Другую форму распространения современных методов исследования сложных физических и технических задач представляет собой внедрение проблемно-ориентированных пакетов прикладных программ. Такие пакеты предназначены для решения некоторого класса задач (например, задач одномерной магнитной гидродинамики с теплопроводностью). Пакеты состоят из системной части (совокупности программ, обеспечивающих общение с пакетом) и функциональной части, содержащей программные модули, из которых системная часть составляет требуемую для решения прикладной задачи версию программы и обеспечива-

ет запуск задачи на ЭВМ для счета. При этом от пользователя пакета не требуется знаний о внутреннем устройстве программы и особенностях методики. Такой стиль работы исключает ненужное дублирование, когда в нескольких организациях большие группы сотрудников занимаются изобретением вариантов численного решения одной и той же задачи и созданием соответствующих программ. При этом в программах используются разные и, как правило, не лучшие методики. Передача в эти организации специализированного пакета, созданного высококвалифицированными специалистами, позволит не только избежать вредного распыления сил, но и обеспечит высокий уровень вычислительных работ.

Добавлю, что пакет может быть снабжен информационной службой, работающей в диалоговом режиме и позволяющей выяснить, какая версия нужна пользователю. Отмечу, что разные физические, механические, химические, биологические и другие явления допускают сходные математические описания. Отсюда следует, что методы и пакеты прикладных программ, разработанные для одной проблемы, могут быть применены для решения многих других проблем.

«Доводка» сложных методик и программ до состояния, пригодного для использования в пакете, представляет трудную задачу. По-видимому, эта работа нуждается в дополнительном стимулировании.

Связь разработчиков пакетов со Всесоюзным фондом алгоритмов и программ, на мой взгляд, должна заключаться в обмене информацией: через фонд заинтересованная организация (пользователь) найдет организацию — создателя пакета.

Следует отметить, что большая часть переданных в фонд программ остается неизвестной широкому кругу пользователей и оказывается «погребенной» в архивах. С другой стороны, отдельные программы, написанные по специальному частно-

му случаю, могут быть пригодны в качестве программного модуля при составлении комплекса программ, предназначенных для решения сложной многовариантной задачи. Однако состыковать программы, написанные в разной манере и по разным поводам, пользователю средней квалификации зачастую просто невозможно. Малоизвестность и низкая приспособленность программ к работе в составе крупного комплекса — вот по крайней мере две причины дорогостоящего дублирования и переписывания программ.

Специализированные пакеты, передаваемые авторами пользователям, лишены, во всяком случае, второго недостатка (трудности в использовании) фонда программ.

Создание новых пакетов может способствовать распространению малоизвестных программ фонда. Совокупность программ фонда должна рассматриваться системными программистами как материал для разработки специализированных пакетов, покрывающих ту или иную предметную область. Повышению эффективности работы фонда программ и алгоритмов может способствовать создание научно-информационного журнала по программам и алгоритмам. Такой журнал совершенно необходим.

— Какие требования предъявляются к специалистам в области вычислительной физики и как ведется их подготовка? Нуждается ли она в изменениях?

— Следует сказать сразу: требования предъявляются высокие.

Специалист в области вычислительной физики должен сочетать знание физики с отличной теоретической подготовкой по дифференциальным уравнениям математической физики, вычислительной математике. Такой специалист умеет указать границы применимости физического приближения, изучить свойства математической модели, выбрать (или разработать) нужный численный алгоритм, быстро написать программу (модуль), которая займет свое место в пакете про-

грамм, квалифицированно провести расчеты и анализ результатов вычислений.

Специалистов, которых можно использовать в области вычислительной физики (к сожалению, очень мало), готовят вузы физического профиля, например МФТИ, физический факультет МГУ, МИФИ, специалистов высокой квалификации готовит также факультет вычислительной математики и кибернетики МГУ. Здесь студенты слушают и сдают также обязательные курсы по физике. Дальнейшее формирование квалификации в большой степени зависит от руководителя дипломной работы.

Мне кажется, что в процесс подготовки физиков-вычислителей обязательно должна входить практика работы в большом коллективе специалистов, занимающихся в рамках ВЭ разработкой актуальной и жизненно важной проблемы. Студенты и аспиранты могли бы принять участие в этой работе в качестве разработчиков отдельных аспектов данной проблемы, например как авторы некоторых модулей пакетной системы или блоков сложной вычислительной программы.

Конечно, при разработке и проведении крупного ВЭ происходит разделение труда и возникает кооперация специалистов узкого профиля (по математической физике, численным методам и программированию). Однако работой руководит, как правило, специалист по вычислительной физике.

Сейчас уже ясно, что ни одна крупная проблема физики и техники не может быть решена без использования численных методов, без применения ВЭ. Поэтому потребность (может быть, не всегда осознанная) в специалистах по вычислительной физике очень велика и неуклонно возрастает, а высшая школа выпускает их недостаточно.

По существу, специалисты по численным методам и их применению (в соответствии со спецификой института) должны готовиться во

всех вузах страны и на физических и химических факультетах университетов. Для этого нужен, конечно, пересмотр программ, создание учебных пособий. В первую очередь следует подумать о пересмотре программы по физике и механике. В существующих курсах в основном излагаются модели, допускающие возможность решения в явном виде, тогда как на практике такая возможность представляется крайне редко. Чрезвычайно велика роль и место численных методов в механике, где имеются хорошо разработанные математические модели (уравнения газовой динамики, теории упругости и т. д.). Глубокое исследование реальных задач механики без применения ВЭ невозможно. Поэтому вузовские курсы должны быть ориентированы на изучение математических моделей, применяемых в практике ВЭ, современных численных методов.

Во вузах также необходимо увеличить подготовку по математической физике, теории численных методов, по теории математических моделей задач физики, механики, химии. Специалисты вузов используют в своей работе простейшие численные методы, элементы ВЭ (например, при решении задач строительной механики). Однако назрела необходимость перевода этих исследований на современный уровень. Без этих мероприятий нельзя добиться внедрения технологии ВЭ во все те области науки и техники, где можно использовать математические модели.

— В решении задач вычислительной физики участвуют большие коллективы специалистов в различных областях физики и математики. Какими, по вашему мнению, должны быть оптимальные формы их сотрудничества?

— Пожалуй, эти формы определяются потребностями дня. Иногда достаточно сложная и трудоемкая задача с точки зрения модели и методов ее решения, в общем, ясна. Так, например, бывает при изучении какой-либо новой модификации

уже решавшейся задачи. В этом случае коллектив вычислителей может ограничиться консультациями со специалистами-физиками и специалистами в области теории численных методов.

Совсем другая ситуация возникает, если поставлена (или только начинается ставиться) принципиально новая задача. В этом случае необходимы совместные исследования с физиками — специалистами из крупного физического центра (вот где физику-вычислителю потребуется хорошее знание физики!), нужна постоянная связь с коллективом математиков, разрабатывающих численные методы (такие коллективы есть, например, в Институте прикладной математики АН СССР, в ВЦ АН СССР, на факультете вычислительной математики и кибернетики МГУ). Форма сотрудничества может быть различной при обязательном условии доброжелательности, взаимного уважения и стремления как можно скорее добиться успеха в решении важной практической задачи. Разумеется, организационные вопросы легче решить, если в коллективе физиков-вычислителей есть хорошие специалисты по физике, математике и численным методам, работающие на передовом уровне науки.

— Решение комплексных народнохозяйственных проблем (например, проблемы УТС) требует привлечения усилий не только физиков и математиков, но и специалистов других естественных и технических дисциплин. Какой вам представляется роль междисциплинарного научного журнала в обсуждении таких крупных задач?

— В настоящее время функции такого междисциплинарного журнала частично выполняет ряд специальных: «Журнал вычислительной математики и математической физики», «Физика плазмы» и другие.

Большую роль в пропаганде вычислительного эксперимента, в привлечении внимания к этому новому, мощному и современному инструменту научного исследования может

сыграть журнал, обращенный к широкому кругу читателей, например ваш «Вестник АН СССР».

Важно подчеркнуть, что использование ВЭ в нетрадиционных для него областях знания приведет к новым достижениям в этих областях. Не менее важно совершенствовать ВЭ и в традиционной сфере его приложений: решение определенной практической задачи методами современного численного эк-

сперимента может существенно повысить эффективность использования ЭВМ, увеличить число задач, решаемых одним коллективом.

Поэтому мы должны вести яркую и доступную широким кругам специалистов пропаганду идей и методов ВЭ. В этом я вижу цель и моего сегодняшнего выступления.

Интервью взяла А. П. КРУЖИЛИНА

Академик

Я. М. КОЛОТЫРКИН:

«Важное звено управления»

— Яков Михайлович, возглавляемый вами Научный совет по электрохимии Отделения общей и технической химии АН СССР призван координировать электрохимические исследования, ведущиеся в Академии наук СССР, в отраслевых научных институтах и вузах страны. В чем, на ваш взгляд, как председателя совета, выражаются сегодня основные достижения и проблемы современной электрохимии, направления ее дальнейшего развития?

— Думаю, что и основные сегодняшние успехи, и перспективы электрохимии, как, наверное, любой другой науки, ярче всего выражаются в достигнутых и ожидаемых в ближайшем будущем практических результатах, в ее вкладе в технический прогресс. При таком подходе неизбежно, хотя, может быть, и в неявном виде, учитываются и важнейшие теоретические, фундаментальные достижения, лежащие в основу прикладных. Конечно, сила любой науки — в непрерывном взаимодействии, взаимовлиянии ее фундаментальных и прикладных разделов, и опыт показывает, что отсутствие такого взаимодействия одинаково губительно сказывается как на развитии теории, так и на прогрессе соответствующей области техники. Однако хотелось бы напомнить слова известного электрохимика конца прошлого и начала нынешнего века

Вильгельма Оствальда, который, рассматривая задачи фундаментальных дисциплин, писал: «Любая самая отвлеченная наука видит оправдание своего существования в надежде оказаться полезной человечеству в качестве науки прикладной».

Важнейшими факторами развития современной технологии являются энергетика и конструкционные материалы. От успехов в этих двух областях решающим образом зависят не только темпы, но и общий характер и направление технического прогресса. Не секрет, что характерные для последних десятилетий его высокие темпы в значительной степени обусловлены переходом на использование дешевых и широко доступных источников энергии — нефти и газа. В то же время наблюдаемый за эти десятилетия быстрый прогресс в области машиностроения и приборостроения во многом обусловлен появлением целой гаммы новых конструкционных материалов (прежде всего материалов на основе высокомолекулярных соединений и композиционных материалов различного состава и структуры). Можно утверждать, что в ряде случаев без наличия подобных конструкционных материалов заметный прогресс этих отраслей был бы вообще невозможен.