

НОВЫЕ ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

681.142+55

ЭЛЕКТРОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МАШИНЫ В ФИЗИКЕ *)*А. Шлютер*

Развитие управляемой с помощью программ электронно-вычислительной техники началось во время последней мировой войны и было обусловлено растущей потребностью в решении различных физических проблем с применением численных методов. Несмотря на то, что большая часть ЭВМ эксплуатируется в сфере коммерции или в целях управления какими-либо производственными процессами, самые большие, самые быстрые и эффективные счетно-решающие устройства служат для исследования физических проблем. Ниже сделана попытка определить круг задач «вычислительной физики», приведены примеры задач, которые должны решаться на ЭВМ, кратко изложен метод «дискретизации» и определены границы эффективного применения ЭВМ.

ВВЕДЕНИЕ

Целью применения счетно-решающих устройств в физике с самого начала была количественная обработка предлагаемых теоретиками формул, а эти формулы физики получали с помощью обычных математических методов. Применение ЭВМ позволило сравнить полученные числа с экспериментом или сделать какие-либо предсказания. Эти предсказания в свою очередь дают возможность подтвердить (доказать) выдвинутые положения теории путем численного сравнения полученного решения с данными измерений.

Естественно, эта задача есть и останется в будущем важнейшей задачей счетно-решающего устройства. Но за последние годы наметилась некая перемена в отношении физиков к ЭВМ: ЭВМ все в большей степени становится тем средством, с помощью которого создается физическая картина явления; ЭВМ выступает, так сказать, как некий самостоятельный источник знаний рядом с экспериментом. Если согласиться с традиционным делением физики на теоретическую и экспериментальную, то следовало бы иметь в виду нечто третье, что обозначается в английском языке понятием «Computational physics» («вычислительная физика»). «Вычислительная физика» — это название самостоятельного журнала, а с недавних пор предмет исследований особого филиала образованного в прошлом году Европейского физического общества.

*) A. S c h l ü t e r, Elektronische Rechenmaschinen in der Physik, Phys. Blätter, 26. Jg., Hf. 8, 343 (1970). Перевод Владислава М. Дубовика.

Автор статьи проф. А. Шлютер — сотрудник Института физики плазмы в Мюнхене.

ФИЗИКА И ЭВМ

Я попытаюсь четко установить, в чем заключается новое отношение физиков к ЭВМ. Прежде всего совсем не так просто определить, что такое собственно физика, или, точнее, какие из точных естественных наук не являются физикой в собственном смысле этого слова. Во всяком случае, в дальнейшем обсуждении допускается широкая интерпретация определения физики, при которой в нее, быть может, включаются теоретическая или квантовая химия, астрономия или астрофизика, метеорология или физика атмосферы, исследования Вселенной или физика космоса.

Физика — наука, основанная на опыте: только опыт решает, что истинно и что неверно, или, точнее, он устанавливает, что является справедливым, а что нет. В этом смысле любая модель, любое описание, любая теория неверны, если они противоречат какому-то наблюдению или измерению. Следовательно, теория — это попытка собрать в единую картину и упорядочить множество экспериментальных данных или их большую часть из какой-либо обширной области познания. При этом для существования третьего понятия, «вычислительная физика», не остается никакого собственного пространства.

Мы должны аккуратнее проанализировать современное положение в физике, если хотим убедиться в том, что в практике физических исследований дело обстоит действительно так.

Будем различать два класса физических исследований. Во-первых, попытки добыть новые основополагающие знания, касающиеся фундаментальных проблем физики, и, во-вторых, попытки в области твердо установленных основ получить обзор совокупности наблюдаемых на опыте достаточно сложных явлений.

К первому классу принадлежит физика элементарных частиц (или физика высоких энергий), а также космология (или область, охватываемая общей теорией относительности).

Второй класс значительно шире, в том смысле, что над проблемами этого класса работает значительно большинство ученых-физиков. Этот класс охватывает, например, физику твердого тела, физику плазмы, химию, метеорологию, так называемую классическую астрономию, биофизику и биохимию.

Надежным фундаментом второго класса является квантовая механика электронов, атомного ядра (как целого) и электромагнитного поля. Здесь имеются подразделы, в которых квантовые эффекты не играют никакой роли, например в гидродинамике или в теории распространения радиоволн.

Эти «классические» подразделы могут быть расширены при известных условиях с помощью специальной теории относительности Эйнштейна и теории гравитации Ньютона. В областях пересечения, где должны приниматься во внимание одновременно либо релятивистские и квантовые эффекты, либо гравитация и квантовые эффекты, напротив, основные знания еще не всегда являются достаточно надежными. В той мере, в какой это имеет место, такие проблемы относятся к первому классу.

«Вычислительная физика» служит в первую очередь для решения задач второго класса. Итак, здесь мы имеем теории, которые можно применять с хорошей надежностью и которые дают формулы, позволяющие предсказывать в принципе выход каждого эксперимента, каждого измерения, насколько это возможно.

ДВА ПРИМЕРА

Возьмем, для примера, какую-нибудь проблему химии. Пусть мы хотим выяснить, как устроена молекула метана, какие она может совершать колебания, какой свет она поглощает или излучает. Чтобы узнать все это, нам в принципе вовсе не обязательно производить измерения. Нам необходимо только записать квантовомеханическое уравнение Шрёдингера для одного ядра углерода, четырех ядер водорода (протонов) и соответствующего числа электронов, а также подставить известные значения масс, зарядов, магнитных моментов и возможных собственных вращающихся моментов. Это будет некое длинное уравнение, которое нужно решить, т. е. найти все или, во всяком случае, многие из его решений для того, чтобы ответить на поставленные вопросы.

Или возьмем физику плазмы, где предпринимаются значительные усилия в целях выяснения предпосылок, при которых можно использовать энергию, высвобождающуюся при слиянии атомных ядер. Возникает важный вопрос: каким образом можно в течение долгого времени удерживать плазму в некотором объеме при условии, что она не станет в значительной мере соприкасаться с материальными стенками. Ответ на этот вопрос можно было бы опять получить путем решения известного уравнения. Известно, что в этом случае можно не учитывать квантовые эффекты; правда, лишь при некоторых ограничениях. Поэтому частицы плазмы можно мысленно заменить электрически заряженными материальными точками, на движение которых частично влияет внешнее электромагнитное поле (приложенное, например, с помощью катушек) и отчасти поле, возникающее за счет их собственного электрического заряда. Уравнения движения материальных точек и уравнения поля можно легко составить.

В обоих примерах полученные уравнения аналитически, конечно, не решаются, т. е. нельзя решить их так, как, например, задачу о движении какой-либо планеты вокруг Солнца. Однако численно их в принципе можно решить, если пользоваться ЭВМ с достаточной производительностью. В нашем втором примере (плазменная ловушка) появился бы путь, позволяющий избежать осуществления чрезвычайно трудных, обширных, длительных и дорогих экспериментов.

Однако именно на этом втором примере сразу же становится ясным, что «достаточно производительной» ЭВМ нет и пока что не будет: для реальной ситуации необходимо было бы численными методами проследить за траекториями порядка 10^{20} частиц, притом все они взаимодействуют друг с другом через электромагнитное поле. Даже если бы мы располагали машиной, в миллиарды раз более быстродействующей, чем имеющиеся в настоящее время, для решения задачи понадобился бы отрезок времени, значительно превосходящий современный возраст Вселенной.

Формальная возможность прямого численного решения задачи о метане (первый пример) также выглядит безнадежно. Описанное уравнение Шрёдингера является некоторым дифференциальным уравнением, имеющим размерность, равную 42, т. е. связывает значения так называемых функций состояния в каждой точке абстрактного пространства размерности 42 со значениями в близлежащей окрестности этой точки (естественно, некоторой абстрактной окрестности, имеющей также размерность, равную 42). Далее, стандартный прием численной обработки заключается в том, что непрерывное пространство заменяется решетчатой системой точек, а окрестность некоторого узла решетки всеми своими соседними узловыми точками. Естественно, решетка должна иметь размерность, также равную 42, и, если разместить на каждом ребре по 10 точек (а это, наверняка, достаточно мало), то решетка будет содержать в совокупности 10^{42} точек,

с которыми и следует работать. Для сложных молекул, например для протеина, числа становятся еще более громоздкими.

В этих двух примерах возникает ситуация, типичная для большинства встречающихся в действительности физических проблем.

И тем не менее есть такие случаи, которые по-своему интересны и для которых затраты на решение невелики.

МЕТОД «ДИСКРЕТИЗАЦИИ»

Теперь мне хотелось бы описать задачу, над которой я работаю: эволюция звездных скоплений. Здесь допустима замена материальными точками, взаимодействующими друг с другом благодаря собственной силе тяжести, или, другими словами, материальными точками, на движение которых влияет гравитационное поле, порождаемое звездами из-за того, что они имеют массы. Эта проблема, в сущности, похожа на упомянутую задачу о плазменной ловушке; правда, взаимодействие несколько проще: прежде всего число частиц (число звезд во многих существующих скоплениях звезд, представляющих интерес) довольно ничтожно, около сотни, так что вычислительная способность действующих ЭВМ является достаточной для численной обработки. Поэтому мы прежде всего обратились к этой проблеме, которая, как может показаться, лежит достаточно далеко вне круга задач нашего института.

Если уж обращаться к такой проблеме, то следует прежде всего позаботиться о численном методе решения. Траектория звезды, или в описанной модели путь материальной точки, в действительности является непрерывной кривой в пространстве, а также непрерывной во времени. Но ЭВМ не умеет, как известно, обращаться с непрерывными величинами, т. е. обрабатывать бесконечное множество чисел. Отсюда следует, что проблема должна быть, как говорят, «дискретизирована». «Дискретизацию» можно проделать, например, разбив траекторию каждой звезды на множество отдельных отрезков конечной длины, которые аппроксимируются посредством, до некоторой степени, простых отрезков кривых, каждый из которых можно описать небольшим числом параметров. В принципе для этого подошли бы отрезки параболы. Удачный выбор способа «дискретизации» может значительно уменьшить затраты на решение; скажем, применительно к нашей проблеме — в тысячу раз по сравнению со старыми стандартными методами. Поэтому мы направили наши основные усилия на развитие способов «дискретизации», но на этом, однако, я не хотел бы здесь останавливаться.

Ну а если найден некоторый подходящий метод и составлена программа, которую машина «понимает» и может выполнить (для указанной выше проблемы это само по себе является многолетним трудом с большим числом повторений и, как установлено на опыте, с усовершенствованиями, получаемыми на основе пробных решений), то звезды помещают согласно мысленной модели в определенных местах, придают им некоторые начальные скорости и смотрят, каким образом развивается и изменяется это скопление звезд согласно той информации, которую обрабатывает ЭВМ. Процесс решения достигает естественного окончания, так как звезды приобретают в конце концов столь высокую скорость, что покидают навсегда данное скопление, и в какой-то момент времени число членов (звезд) становится незначительным настолько, что они уже не представляют собой скопления. Таким образом, процесс решения прекращают, когда в скоплении остается, например, только 15 звезд. Затем изменяют начальные условия и снова повторяют решение до так называемого естественного окончания. Потом снова делают замену и т. д.

А как обстоит дело с результатами? Естественно, никого не интересует, где будет находиться каждая из звезд некоторого скопления через несколько миллионов лет, если они сегодня находятся на совершенно определенных местах и обладают точно известными скоростями. Интересуются, как правило, лишь глобальными свойствами, например изменением средней скорости звезды в зависимости от возраста скопления, изменением размеров скопления (для этого, естественно, необходимо точно указать, как определяется объем какого-либо скопления).

Физик, работающий на ЭВМ, подходит к этим численным результатам так же, как экспериментатор к серии измерений. Либо совершенно упрощенно, либо руководствуясь каким-то теоретическим ожиданием, либо, будучи полным недоверия к какому-либо теоретическому предсказанию, он пытается установить по результатам физическую закономерность. Например, в нашем случае было распространено теоретическое ожидание, что звездное скопление, которое стареет, сжимается и его объем уменьшается. Во всех до сих пор осуществленных нами решениях объем, напротив, сильно возрастал, в 10^4 — 10^6 раз. Таким образом, мы должны были на основе этих численных экспериментов предположить, что такая эволюция является закономерной и ей подчиняются реальные скопления звезд.

Итак, если установлены какие-либо закономерности, то при благоприятном исходе они могут подтвердить имеющуюся теорию, а при неблагоприятном исходе — как, например, у нас — дать повод к пересмотру теории. в частности, из-за того, что проверяются дополнительно предположения, на которые должна опираться каждая теория: здесь мы говорим как раз о проблемах, которые могут быть решены точно лишь с помощью расчета на ЭВМ.

ГРАНИЦЫ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ЭВМ

Выполняя численные эксперименты, физик сталкивается еще с одной проблемой, о которой нельзя не упомянуть. Она соответствует в какой-то мере проблеме, встречающейся в некоторых лабораторных экспериментах: можно ли повлиять заметным образом на результат измерения самим измерением, измерительной аппаратурой или процессом измерения; быть может, это совершенно портит дело. В применении к проблемам численных экспериментов это — возникновение ошибок, которые происходят в силу необходимой почти всегда «дискретизации», и тех ошибок, которые приносятся из-за использования в ЭВМ чисел с ограниченной точностью. Ошибки от «дискретизации» называют также ошибками из-за отбрасывания значащих цифр (truncated error), а ошибки, которые возникают вследствие не сколь угодно точного выполнения арифметических операций, называют погрешностями округления. Конечно, можно уменьшить ошибки из-за отбрасывания цифр, усовершенствовав процесс «дискретизации», однако это не только повышает соответствующее время счета, но и приводит к увеличению числа округлений и поэтому общей ошибки округления. В нашем примере со звездными скоплениями — это очень серьезная проблема.

Математические рассуждения, а также численные эксперименты показывают, что невозможно с помощью современных ЭВМ настолько точно рассчитать траектории звезд, чтобы после нескольких миллионов шагов счета ошибки при расчете траекторий не привели к полному искажению результатов (положения звезд). Возникает принципиальный вопрос: влияют ли существенным образом эти ошибки на общие свойства процесса? Этот вопрос является характерным для «вычислительной физики» и притом недостаточно удовлетворительно разработанным.

Я рассмотрю теперь коротко вопрос о наличии численных решений вообще — это вопрос, существенный для всех ЭВМ. Здесь помогают упрощающие предположения.

Например, в упомянутой задаче о метане можно предположить, что так называемые внутренние электроны углерода не дают прямого вклада в химическую связь. Можно также воспользоваться обоснованным утверждением, что квантовомеханические эффекты от движения ядер углерода незначительны.

После достаточного упрощения можно получить фактически проблему, численно разрешимую, и к этой проблеме относиться так же, как к проблеме звездных скоплений. Конечно, нужно хорошо обдумать зависимость результатов от упрощающих предположений. Здесь также могут помочь численные эксперименты, в которых пересматривается право на существование таких предположений для упрощенных случаев. Это можно рассматривать как план задуманного нами перехода от решения проблемы звездных скоплений к задаче о плазменной ловушке.

Предположим, мы хотим знать: при каких условиях огромное число взаимодействующих частиц можно описывать в общих чертах, как некую жидкость? А уже исследованием свойств жидкостей можно с успехом заниматься, пользуясь методами «вычислительной физики», на больших ЭВМ, и тем самым избавиться от экспериментов. Я не хочу, однако, останавливаться на этом подробнее.

В случае истинно фундаментальных проблем физики, отнесенных нами к проблемам первого класса, «вычислительная физика» применяется еще относительно мало. Но и здесь положение изменится, так как с точки зрения «физика-вычислителя» нет практического различия в смысле обработки громоздких проблем второго класса и проблем первого класса, поскольку всегда исследуются численные следствия теоретических предпосылок. Здесь теоретические предположения не являются, однако, теми приближениями, которые вводятся при упрощениях. Здесь сама теория должна быть подтверждена путем сравнения с действительностью. Характерное отличительное свойство «вычислительной физики», заключающееся в диалогоподобном общении физика с ЭВМ, не является пока еще совсем отчетливым, но достаточно ярко проявляется в ситуации, которую мы обсуждали в самом начале и с которой исследователи сразу же столкнулись, взявшись за разработку «классических» вопросов физики.

«Вычислительная физика» как раз только начала вносить реальный вклад в развитие физических представлений. В будущем она наверняка будет играть более важную роль, так что умение «разговаривать» с ЭВМ станет обычным навыком подавляющей части физиков. Это произойдет не только потому, что многие научатся обращению с ЭВМ (и от этого использование ЭВМ станет более эффективным), но также и потому, что быстрыми темпами, очевидно, будут разрабатываться и создаваться ЭВМ большей эффективности; при этом расходы, связанные с процессом вычислений, будут становиться менее значительными. Это случится еще и потому, что в силу необходимости изменится точка зрения многих физиков — они наверняка будут во все возрастающей степени заинтересованы в том, чтобы вводилось в строй побольше ЭВМ. И, наконец, соперничество с лабораторным экспериментом, а это и есть конкурент «вычислительной физики», приведет (из-за постоянно растущей стоимости ответственных экспериментов) к переходу на более дешевый путь, которым чаще всего и будет применение методов «вычислительной физики».