Gurij I. Marčuk
Metodologické aspekty matematického modelování

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 28 (1983), No. 5, 241--247

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/139420

Metodologické aspekty matematického modelování

Gurij I. Marčuk, Moskva

V polovině května 1982 byl na oficiální pracovní návštěvě v ČSSR náměstek předsedy rady ministrů SSSR akademik Gurij I. Marčuk.

Akademik Marčuk je znám jako přední světový odborník v aplikované matematice, e čestným doktorem Univerzity Karlovy. V rámci neoficiální části svého programu pronesl 14. května 1982 v „Modré posluchárně" Karolina odbornou přednášku pro posluchače matematicko-fyzikální fakulty UK a vědeckou veřejnost. Otiskujeme zde autorizované znění přednášky pořízené ze zvukového záznamu). (Redakce PMFA)*

V epoše prudkého rozvoje elektronické výpočetní techniky zcela výjimečná úloha náleží matematickému modelování. A nikoli náhodou: matematický model se stal důležitým prvkem vědeckého poznání nových zákonitostí, nových procesů a jevů. V dnešní době se matematické modely uplatňují při řešení nejrozmanitějších úloh moderní vědy a techniky. Jsou to nejen problémy samotné matematiky, ale i matematické fyziky, hydrodynamiky a mechaniky. Je to řešení kosmických problémů, problémů medicíny, atomové energie, sociologie, jakož i životně důležitých problémů ekonomiky.

Tak vypadá škála – zdaleka ne úplná – možných aplikací matematického aparátu a elektronických počítačů. Ale při vší skvělé technice, rychlosti, paměti a intelektualizaci počítačů, základem matematického modelu zůstává naše poznání daného jevu. Poznání, jež se ustavičně zpřesňuje experimentem a teoretickou interpretací procesů. A jestliže tvořivé zkoumání je korunováno formulací modelu dostatečně přiměřeného tomuto jevu, pak na základě tohoto modelu můžeme řešit rychle a efektivně i ty nejsložitější úlohy.

Je třeba konstatovat, že matematické modelování zaznamenalo příliv nových idejí. Vezměme například automatického robota. Chceme-li vytvořit kinematiku soustavy, jež by řídila chování robota, můžeme jít dvojí cestou. První spočívá v tom, že sestavíme příslušnou soustavu diferenciálních rovnic, korektně zformulujeme matematickou úlohu, a konečně tím, že měníme parametry, „naučíme" soustavu „plnit" požadované funkce. Jdeme tedy cestou matematického modelu učících se automatů.

---

*) Zvukový záznam zpracoval a autorizovaný text přeložil Pavel Goralčík.

Druhá cesta je poněkud odlišná. Jestliže náš robot nemá zařízení, jež by mu vyladilo optimální pracovní režim, přispěchá mu na pomoc kvalifikovný odborník a skrze motorické soustavy robota sám vykoná nutné operace. Opakováním si je robot zapamatuje a nakonec začne sám provádět tytéž úkony jako člověk.

V tomto případě se ona nesmírně složitá soustava rovnic nachází v lidské hlavě. Tam se v skrytu řeší pomocí vlatního výpočetního a logického aparátu, na základě vlastní zkušenosti, a tato zkušenost se pak adekvátně předává automatickému zařízení.

Vidíme tedy, že matematické modely mohou být různých úrovní. První úroveň – v našem příkladě je to model učících se automatů – představují skutečné matematické modely. Druhé úrovně, o níž jsem hovořil, jsou modely typu „černé skříňky". Tady nevíme, jak se rovnice řeší, vlastně se fakticky ani neřeší, přesto je tu jakási zobecněná výslednice vnitřní práce, jež má podobu nahromaděné lidské zkušenosti, a ta se předává technice. Je však nutno zdůraznit, že kterákoli úroveň matematického modelování vyžaduje velmi přesnou formulaci výchozí úlohy. Právě v této formulaci musí být zahrnuty technické požadavky na realizaci procesů, jež se mají diskrétně modelovat na elektronických počítačích.

Je proto velmi důležité abychom uměli dobře zformulovat úlohu. Současný stav lidského poznání v mnoha případech dovoluje, abychom při tom postupovali na základě hotových poznatků. Všechny úlohy totiž zpravidla odrážejí rovnovážné vztahy, jež můžeme zapsat buď v algebraické podobě, nebo ve tvaru diferenciálních, integrálních nebo integro-diferenciálních rovnic. Ty odrážejí více méně adekvátně studované procesy. Tyto vztahy – vlastně je nazýváme matematickými modely – zahrnují soubor neznámých vstupních koeficientů rovnic. Proto jedním z úkolů výzkumu je vyhledat ty třídy úloh a ty podmínky, při nichž je každá z rovnic korektní; kdy malým poruchám vstupních údajů odpovídají malé poruchy samotného řešení.

Nakonec je zapotřebí určit úrovňové koeficienty rovnic, jež mají vystupovat v reálném zobrazení procesu. Jako příklad si vezměme imunologickou reakci lidského organismu napadaného baktériemi nebo viry. V nejjednodušším případě její matematický model má podobu dosti složité soustavy čtyř obyčejných diferenciálních rovnic se zpožďujícím se argumentem.

První rovnice v tomto případě popisuje proces růstu virové populace, druhá dynamiku protilátek, třetí dynamiku protilátek lymfatických buněk a konečně čtvrtá rovnice popisuje, jak jsou funkčně zasaženy orgány. Taková soustava v podstatě odráží základní zákonitosti reakce organismu na intervenci antigenů – baktérií nebo virů.

Ale každý člověk je individualita. Úkolem badatele, jenž nesměřuje k obecně statistickým zákonitostem, nýbrž k individuálním zvláštnostem, je vyladit model na ty parametry, jež odrážejí reálné funkcionální závislosti reakce organismu. Jen pak je model schopen více méně správně odrážet individuální zvláštnosti obranného mechanismu určitého člověka.

Avšak nám nejde jen o to, abychom poznali zákonitosti patologického napadení toho či onoho orgánu. V první řadě se musíme naučit co nejrychleji pomoci nemocnému. Na to se musíme obzvláště soustředit, to znamená, že funkcionálem úlohy se stává trvání nemoci. Jde o to minimalizovat tento funkcionál. Vzhledem k tomu musíme do rovnic soustavy zavést parametry imitující působení různých preparátů a aplikaci terapie. Na základě takového modelu pak hledáme optimální strategii, při níž imunologická soustava oranismu co nejefektivněji ničí antigeny a napomáhá co nejrychlejšímu uzdravení.

Matematický imitační model tak vytváří situaci, kdy můžeme proces léčení řídit. V Sovětském svazu se matematické modelování dynamiky nemoci prudce rozvíjí. Lékařství má zapotřebí stále nových a nových fundamentálních idejí, protože léčit nemocné podle středních statistických údajů není právě nejlepší. Jde o to, abychom pomohli imunologickému systému jedince se znalostí jeho individuality zvládnout antigenovou populaci a překonat nemoc. Teoretické a experimentální výzkumy imunologického systému jsou krajně složité a právě matematické modelování je může obohatit o nové ideje a podstatně jim pomoci kupředu.

Uvedu pro ilustraci konkrétní příklad.

Je známo že chronické podoby některých nemocí, často provázené systematickým zhoršováním, se jen velmi těžce léčí. Lékaři na celém světě si lámou hlavu nad tímto problémem, ale zatím mohou jen „zaléčit" akutní podobu nemoci a uvést organismus do klidového stavu. V tomto stavu organismus produkuje přesně tolik protilátek, aby stačil neutralizovat působení nově vznikajících virů nebo baktérií, orgán se tedy obnovuje v té míře, v jaké je poškozován. Takovýto stav permanentní nemoci se stává pro organismus přirozeným stavem, jeho imunologický systém se ustálí v režimu, pro který je přítomnost baktérií v organismu normální.

Skupina nadšenců matematiků z novosibirského Akademického městečka se rozhodla, že se bude zabývat problémem léčení chronických nemocí.

Vznikly matematické modely a vyzkoušely se nejrůznější imitace. Když vědci vyzkoušeli stovky, ne-li tisíce, nejrůznějších variant řešení úlohy odpovídajících různým terapiím, nabyli přesvědčení, že existující metody nejsou s to vyvést člověka z chronického stavu. A tu vznikl nápad postupně zvětšovat populaci antigenů v organismu. Když koeficient imitující koncentraci antigenů zvětšili třicetkrát ve srovnání s „normou", organismus překvapivě zareagoval na tak velkou porci „nepřítele" velmi prudce: „zapnul" imunologický systém na plné obrátky a vypořádal se s antigeny... Tak alespoň to proběhlo v matematickém modelu.

Potom se matematici spojili s lékaři z jedné moskevské kliniky a již společně došli k závěru, že je možné vytvořit tak zvanou „odpoutávací terapii" založenou na efektu zostření. Její podstata rozpracovaná na matematickém modelu spočívá v tom, že chronicky nemocnému zavádíme injekcemi polysacharidní látku peroginal. Dáváme mu injekce a stále zvětšujeme dávku, čímž ho nutíme, aby každý den asi po čtyři hodiny bojoval se zavedeným antigenem. Po tuto dobu imunologický systém považuje peroginal za nepřítele číslo jedna a jeho pozornost se odvádí od chronické nemoci. Množství těch antigenů, jež jsou odpovědny za chronickou chorobu, se desetinásobně zvětšuje a základní onemocnění se začíná zostřovat.

Imunologický systém, jejž injekce peroginalu přivedly do aktivního stavu, rozpozná v chronickém onemocnění svého pravého nepřítele, zapomene na příměří, jež vlastně znamenalo chronický průběh nemoci, a pustí se s ním bez prodlení do boje. Potlačí populaci antigenů odpovědných za chronickou nemoc a člověk se uzdraví.

Tento výsledek právem považujeme za úspěch imunologie a matematického modelování. Na soumezí imunologie a matematického modelování tak vznikl nový vědecký směr v medicíně. Uvedl jsem tento příklad proto, abych konkrétně ukázal, jak v jedné z nových oblastí vědění – imunologii – dal matematický model zcela nový impuls medicíně.

Můžeme uvést i jiné příklady. Třeba z oblasti ochrany životního prostředí, jednoho z největších současných problémů lidstva.

Připomeňme si, že jedním z důležitých produktů spalování topiv je kysličník siřičitý. Každoročně jen v důsledku hospodářské činnosti lidí proniká do atmosféry více než sto miliónů tun tohoto plynu. Ve styku s vodní párou z něho vzniká kyselina sírová. Zvážíme-li rozsah emise, je zcela jasné, jak velké škody může napáchat jen tato jediná škodlivina v životním prostředí.

Existuje mnoho dalších činitelů, jež narušují ekologickou rovnováhu v přírodě. Nicméně cíl, k němuž směřujeme, když rozvíjíme průmysl, je rozmnožit blaho člověka. Je v tom rozpor: z jedné strany je třeba zachovat životní prostředí; ale bez energie není života, proto musíme spalovat topiva a to zase znamená nepříznivý zásah do životního prostředí. Jak najít kompromis?

Sovětští matematici se začali aktivně zabývat tímto problémem a došli již k určité koncepci. Novinkou této koncepce je závěr, že opatření směřující k ochraně životního prostředí je třeba zabudovat do projektových rozpočtů objektů, jež se mají stavět. A nikoli jen náklady na obnovování narušené základní rovnováhy, nýbrž i na zlepšování životního prostředí. To je ekonomický problém. Kromě toho tu máme problém zdraví. Představme si, že v nějaké velké oblasti máme tři osídlená místa, rekreační místa, lesy a pole. Pro každé z těchto tří míst je známa mezní přípustná hodnota znečištění emisemi elektráren a dalších průmyslových objektů, jež v podobě aerosolů vycházejí z komínů, částečně se usazují na těchto územích a zvětšují tak jejich znečištění.

Mezní dávka je zákon, jejž není dovoleno překračovat. Pro matematiky tím vzniká tato úloha: najít takové umístění zdroje znečištění, aby maximální koncentrace aerosolů na zvolených územích byla minimální. Jde o klasický problém minimaxu, tedy jeden z nejtěžších v matematice, zpravidla úporně vzdorující řešení. V daném případě se podařilo ho řešit pomocí matematických modelů a speciálním způsobem zkonstruovaných rovnic.

V podstatě věc vypadá takto. Předpokládejme, že jsme již zvolili umístění průmyslového objektu. Chceme-li vyčíslit stupeň znečištění té či oné oblasti, musíme řešit rovnici difúzního typu, jež popisuje proces šíření příměsi. To je dosti složitá úloha, zpravidla třírozměrná, nestacionární, s řadou zvláštností v parametrech. Dejme tomu, že se nám podařilo ji vyřešit a že jsme určili stupeň znečištění daných oblastí zdrojem umístěným ve zvoleném bodě. Ale nakolik je správná z našeho hlediska volba tohoto bodu? Co se stane, když objekt umístíme v jiném bodě? Ještě v jiném? V desátém? Abychom došli ke správnému rozhodnutí, museli bychom probrat stovky a tisíce variant, a na to již nestačí ani ty nejvýkonnější moderní elektronické počítače.

Nedala by se naše úloha přece jenom nějak řešit? Ukázalo se, že musíme uvažovat tak zvanou konjugovanou úlohu. Číselná hodnota řešení této úlohy v nějakém bodě a pro speciálně vybranou pravou stranu odpovídá informaci o stupni znečištění dané oblasti polutantem umístěným v tomto bodě. Jinak řečeno, pro zvolenou oblast nám řešení konjugované úlohy udává množství spadlého aerosolu při libovolně umístěném zdroji znečištění, přičemž toto množství je rovno hodnotě řešení konjugované úlohy v bodě předpokládaného umístění objektu. Jestliže takovýchto oblastí je více, řešíme příslušnou konjugovanou úlohu pro každou z nich. Průnik oblastí vhodných pro umístění objektu v odpovídajících případech udává oblast, v níž můžeme objekt stavět se zárukou, že všechny zdravotní normy budou dodrženy. Matematicky je to velmi pěkná úloha. Z jejího řešení okamžitě dostaneme i řešení problému minimaxu, totiž bod, z něhož maximální znečištění celého souhrnu zón průmyslovým objektem bude minimální.

Ale zvídavost matematiků tím nebyla ještě ukojena. Rádi by ještě věděli, co se bude dít, když se nepatrně pozmění hodnoty všech parametrů modelu. Tak došlo ke vzniku teorie poruch.

Předpokládejme, že všechny parametry modelu jsou určeny a že model adekvátně popisuje nějaký proces. Porušme nyní některý z parametrů modelu, například rychlost větru, koeficient turbulence nebo koeficient interakce s povrchem. Je přirozené, že se tím změní řešení úlohy nebo hodnota funkcionálu na něm.

Je dobře známo, že v reálné situaci parametry modelu podléhají poruchám — to je vlastností každého fyzikálního modelu. Abychom nemuseli řešit úlohu o šíření příměsi znovu pro každou malou poruchu, je žádoucí mít formuli, jež by uváděla do bezprostředního vztahu variace všech parametrů s variací funkcionálu.

Tak vznikla teorie malých poruch.

Ukázalo se, že právě ta základní úloha, o níž jsme již hovořili, spolu s konjugovanou úlohou a teorií poruch dává možnost vybudovat teorii vyhodnocování malých poruch hodnot znečištění. Současně získáváme možnost řešit úlohy teorie „optimálního řízení znečištění".

Právě tímto způsobem nyní počítáme znečištění průmyslovými objekty na Sibiři: Kansko-Ačinský energetický komplex, Krasnojarský komplex, Udokanské naleziště mědi. Problémy, kde stavět výrobní závody a kde sídliště, se řeší pomocí matematického modelování.

V příkladech bychom mohli pokračovat. Svědčí o tom, že vzhledem k mnohosti faktorů člověk již nevystačí se zdravým rozumem, aby našel optimální řešení pro složité procesy s velkým počtem omezení. Ale dobře připravená metodologie a cvičený badatelský intelekt je schopen vytvořit model, jenž adekvátně odráží tyto procesy a pomáhá najít řešení.

Závěrem bych se chtěl zmínit o struktuře současných elektronických počítačů, protože ta by se měla přizpůsobovat struktuře matematického zabezpečení. Navíc budoucí stroje budou stále inteligentnější. V souvislosti s tím vyvstává otázka tak zvaných virtuálních systémů, jež by byly přizpůsobeny potřebám individuálního uživatele. Pomocí nich můžeme pro výzkumníka na základě programu vytvořit takovou výpočetní strukturu, jež by co nejlépe odpovídala daným třídám imitačních modelů. Je proto nyní úkolem matematiků, aby z celého množství různých matematických algoritmů vyhledali základní, jež se nejčastěji používají ve výpočtech. Na základě této informace se budou stavět speciální procesory z mikroobvodů nebo minipočítačů, jež zrychlí výpočty desetkrát, stokrát i tisíckrát. Zkrátka matematikům nastaly časy, kdy požadavky na elektronické počítače již nediktují inženýři, ale matematici a ti specialisté, kteří se zabývají jejich využitím v aplikacích.

Žijeme v době, kdy právě v matematice a jejích aplikacích se soustřeďují mnohé směry vědeckotechnického pokroku. To od nás vyžaduje, abychom věnovali zvýšenou pozornost rozvoji teoretických problémů matematiky, jež nejen napomáhají správné formulaci úloh matematického modelování, ale i prostřednictvím vět naznačují, kde hledat možné řešení, dávají podmínky jednoznačnosti, stability a korektnosti řešení. Konstrukce výpočetního algoritmu zpravidla dovoluje převést složitou soustavu rovnic na úlohu lineární algebry.

Na Karlově univerzitě na katedře profesora Marka a v Matematickém ústavu ČSAV v oddělení doktora Prágera probíhá hluboký výzkum převádění úloh se spojitým argumentem na úlohy s diskrétním argumentem. Problém zde záleží v tom, že chceme úlohu zjednodušit na úlohu lineární algebry, aniž by se při tom změnily vlastnosti operátorů. Kromě toho je třeba lineární úlohu rozštěpit na jednotlivé jednodušší úlohy (moduly), jež by se daly postupně řešit, a tím se složitá úloha zredukuje na jednodušší úlohy.

Numerická matematika má nyní tak bohatý arzenál prostředků a lidstvo vytvořilo tak výkonnou výpočetní techniku, že jsme schopni s různým stupněm aproximace řešit prakticky kteroukoli úlohu, jež vznikne ve vědě a technice.

Nové technické prostředky však vyžadují, abychom aktivně hledali nové algoritmy pro operace s maticemi, vektory a komplexními čísly. Zvýší se tím úroveň využívání prostředků výpočetní techniky, bude méně pracné a účinnější. Tato úroveň nám vbrzku dovolí, abychom pracovali s pologrupami, nekonečnými řadami, asymptotickými rozklady, a tím nám zpřístupní klasické metody matematické analýzy a jejích aplikací. Právě proto musíme stále pečovat o rozvoj nových idejí a metod numerické matematiky. Přesná formulace matematické úlohy a její redukce na jednodušší podoby dává možnost vytvářet nové algoritmy pro jejich řešení na nových technických prostředcích.

Měl jsem příležitost zabývat se mnoha směry numerické matematiky a matematického modelování. Práce na soumezí různých oblastí vede k tomu, že si rychle uvědomujeme vývojové tendence všech tří složek: teoretických otázek matematiky, numerických metod a prostředků výpočetní techniky. Tyto složky se dnes semkly do jednotné soustavy poznatků, jež se stala fundamentálním článkem široké matematizace všech věd, jejich solidním informačně kvantitativním základem. Stále více hovoříme o matematické informatice, neboť ta ve všech svých projevech znamená další krok, do něhož bude vtažena celá společnost i každý jednoltivec, a to nezávisle na tom, jakou specifickou oblastí činnosti se zabývá nebo jakou ovládá.

Po přednášce akademika Marčuka následovala diskuse, které se zúčastnila řada zástupců různých vědeckých pracovišť. Dotazy a náměty se týkaly používání konkrétních programovacích jazyků na aplikovaných pracovištích v SSSR, možností výměny informací mezi socialistickými zeměmi, pokud jde o počítačové programy, výchovy studentů k aplikacím matematiky a vztahů mezi matematikou a společenskými vědami. Také se hovořilo o konkrétní spolupráci mezi některými pracovišti v SSSR a ČSSR.

Veřejné zasedání zakončil rektor Univerzity Karlovy prof. JUDr. Zdeněk Češka, člen korespondent ČSAV.

Potom setrval akademik Marčuk v delší přátelské besedě s představiteli MFF UK a ústavů ČSAV.

Axiomatizácia fyzikálnych systémov a „kvantové logiky"

Sylvia Pulmannová, Bratislava

1. Úvod

Začiatok éry modernej kvantovej mechaniky je vyznačený takmer súčasným objavením sa dvoch článkov: článku Heisenberga (1925, [25]) a Schrödingera (1926, [44]). Prvý z nich navrhol formalizmus maticovej mechaniky, zatiaľ čo druhý navrhol formalizmus vlnovej mechaniky. Obe tieto formulácie sú fyzikálne ekvivalentné a možno ich zahrnúť do obecnejšej formulácie kvantovej mechaniky, ktorú navrhol Dirac (1930, [8]) a matematicky presne sformuloval von Neumann (1932, [32]).

Každá fyzikálna teória obsahuje určitý matematický formalizmus, tj. súbor symbolov a pravidiel, ktorými sa tieto symboly riadia. Pomocou symbolov sa formulujú tvrdenia a vety a pomocou daných pravidiel môžeme odvodzovať nové tvrdenia z tvrdení daných. Dôležitou súčasťou formalizmu je dynamický zákon, ktorý umožňuje predpovedať chovanie sa fyzikálnych systémov v budúcnosti, t.j. dáva fyzikálnej teórii prediktívny charakter. Druhou hlavnou zložkou fyzikálnej teórie sú korešpondenčné pravidlá, ktoré priraďujú symbolom formalizmu empirický význam. Súhrn korešpondenčných pravidiel určuje fyzikálnu interpretáciu teórie. Korešpondenčné pravidlá klasickej mechaniky sú veľmi názorné a priamočiare a dávajú jednoznačnú fyzikálnu interpretáciu. Inak je tomu v kvantovej mechanike. Všeobecne prijatá formulácia kvantovej mechaniky je založená na Hilbertových priestoroch. Jej axiómy sú často kritizované ako umelé, vzdialené priamej experimentálnej overiteľnosti a vyvolali dosiaľ trvajúcu diskusiu o interpretácii a o alternatívnych teóriách merania v kvantovej mechanike. Bolo navrhnutých niekoľko alternatívnych formulácií [20], ktoré sa snažia vychádzať z axióm podľa možnosti prirodzených a fyzikálne zdôvodnených. Hľadá sa odpoveď na otázku, prečo sa na popis kvantovomechanického systému hodí práve Hilbertov priestor, resp. či neexistuje adekvátnejší popis. Najznámejšie sú tieto alternatívne formulácie kvantovej mechaniky: tzv. algebraický prístup ([15], [23], [27], [45]),