

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАУКЕ

Путешествие в неизведанное

Что будет, если столкнутся «черные дыры»? Если поставить эксперимент невозможно, ученые моделируют ситуацию на компьютере. Насколько практичны полученные в ходе таких экспериментов результаты?

Для изучения какого-либо явления необходимо создать условия его существования, что не всегда является возможным. Появление компьютеров позволило проводить эксперименты путем их моделирования. «Без компьютерного моделирования мы бы никогда не создали струйный принтер», — признался Росс Аллен (Ross R. Allen), руководитель проекта и основатель научного направления лаборатории Hewlett-Packard в Пало-Альто. На вопрос, не могло ли в этом помочь создание опытных образцов, Аллен решительно качает головой: «Это оказалось невозможным. Техникам не хватало основополагающих знаний о конструкции нового принтера».

С 1981 по 1983 годы химик Росс Аллен работал над созданием программного обеспечения, моделирующего поведение мельчайших капелек чернил. Нужно было выяснить, что происходит, когда жидкость выпрыскивается из сопла в воздух, и какие силы действуют на капельки, когда они соприкасаются с бумагой. Это программное обеспечение он написал для одного из самых мощных компьютеров тех дней — Vax.

Целую неделю машина билась над 10 тысячами знаков кода, написанного на языке программирования Фортран. В конце концов компьютер вычислил,

что происходит с капельками чернил в течение первых, самых решающих 100 микросекунд. После того, как ученый на основании этих расчетов определил оптимальную форму сопла и патрона с чернилами, техники смогли сконструировать опытный образец.

Для достижения своих целей Аллену пришлось создать комплексное программное обеспечение, учитывающее все, что знала современная физика о поведении жидкостей. Результат, который преподнесла компьютерная программа, поразил даже ее создателя. До этого дня ни один ученый ничего не знал о том, как капелька чернил приобретает свою форму.

Компьютер превращает кремний в металл

ПО, созданное в начале 80-х годов Россом Алленом для моделирования поведения жидкостей, стимулировало создание подобных программ для других областей науки. Профессор Мичель Парринелло (Michele Parrinello) совместно со своим коллегой Роберто Каром (Roberto Car) создал в 1985 году в университете Триеста программу компьютерного моделирования поведения атомов, получившую название «Car-Parrinello Molecular Dynamics».

Занимаясь исследованиями твердого тела в институте Макса Планка в

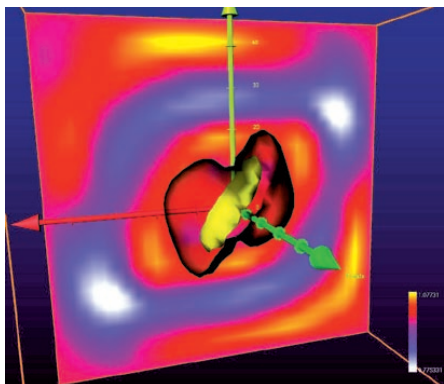
Штуттгарте, Парринелло заинтересовался свойствами кремния. Оказалось, что при нагревании до определенной температуры кремний превращается в электропроводящий металл. Этот результат, имеющий чрезвычайно важное практическое значение для создания компьютерных чипов, Кар и Парринелло получили благодаря компьютерному моделированию поведения отдельных атомов.

Созданное программное обеспечение используется для исследования других веществ учеными в различных химических институтах и промышленных предприятиях, таких как BASF или Hoechst. Например, при производстве полимеров нужно создать длинные молекулярные цепочки. Но без присадок катализаторов полимеры довольно долго переходят в стабильное состояние. На компьютере можно любым образом

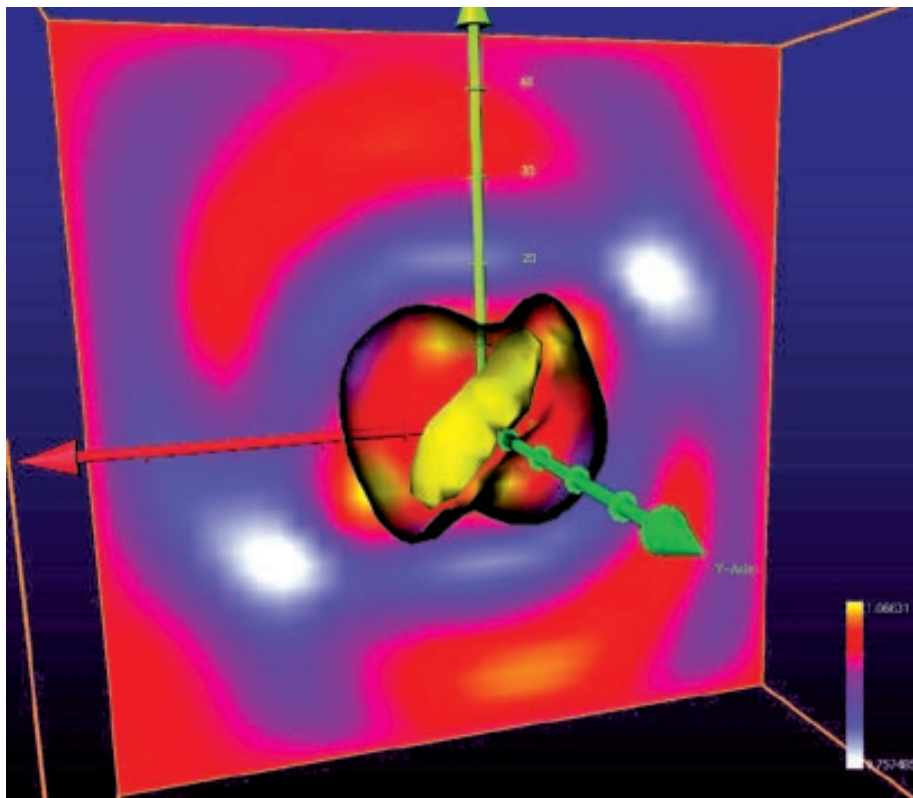


Др. Росс Аллен,
лаборатория HP в Пало-Альто

«Компьютерное моделирование помогает ученым понять многие процессы»



Столкновение нейтронных звезд: в институте Альберта Эйнштейна в Потсдаме ученые смоделировали космическую катастрофу. Две звезды притянулись друг к другу и слились в одну, как показано на последовательности рисунков слева направо на страницах 1 и 2. Это вызвало возникновение в космосе мощных гравитационных волн, распространяющихся со скоростью света



комбинировать различные вещества, задавая требуемую температуру и давление, и получить представление о составе материала гораздо быстрее, чем это позволяют сделать лабораторные исследования.

Самая последняя и самая захватывающая удача итальянского физика Мишеля Парринелло связана с моделированием в области астрофизики. На компьютере Cray T3E он «нагрел» воду до 6000 градусов Кельвина и подверг ее воздействию давления, которое в миллионы раз превышает давление воздуха на земле. Экстремальные значения температуры и давления связаны с моделированием условий на планете Уран, в недрах которой, по данным измерений, полученных с помощью спутников, могут находиться огромные резервуары воды. Благодаря моделированию Парринелло смог дать физическое объяснение результатов этих измерений.

Когда вода становится металлом

Результаты этого эксперимента с новой силой инициировали исследования космического пространства. Например, значения магнитного поля планеты Нептун можно объяснить только тем, что в недрах этой планеты находится жидкость, которая обладает высокой

электропроводностью. Может ли быть так, что под воздействием экстремальных значений давления и температуры вода приобретает такие необычные свойства?

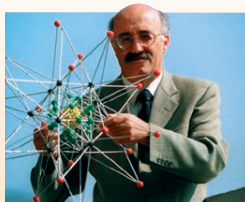
Результат недельной работы суперкомпьютера в институте Макса Планка в Штуттгарте стал настоящим сюрпризом для специалистов: под воздействием высоких температур и высокого давления вода действительно

превращается в металл с магнитными свойствами.

Парринелло гордо представил модель, созданную на основе результатов удачного эксперимента. Согласно этой модели атомы вступают в новое соединение, в результате чего молекула H_2O , известная из уроков химии, превращается в совершенно новую атомную структуру.

Мишель Парринелло уже подумыва-

ИНТЕРВЬЮ • ИНТЕРВЬЮ • ИНТЕРВЬЮ • ИНТЕРВЬЮ



Мишель Парринелло, директор института Макса Планка в Штуттгарте, с разработанной им моделью молекулярного кластера

«Исследование без компьютерного моделирования немыслимо»

ЧИП: Какое место в науке занимает моделирование?

М. П.: Сегодня без моделирования исследование в области естественных наук немыслимо.

ЧИП: При этом компьютер берет на себя роль основного мыслителя?

М. П.: Как и ранее, требуется интуиция ученого. Он должен определить взаимосвязи и из всех возможностей, рассчитанных компьютером, выбрать правильные.

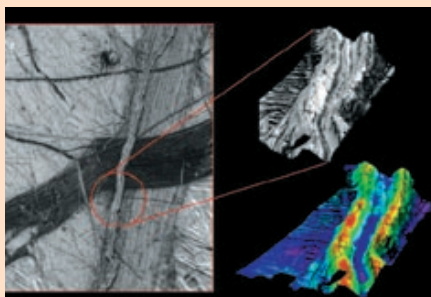
ЧИП: Результаты Вашего моделирования поражают. Взять, например, воду, которая на планете Уран превращается в металл, проводящий электро-энергию. Однако, нужны ли кому-нибудь эти результаты?

М. П.: То, что на первый взгляд может показаться ненужным, помогает нам более полно понять сложные системы и процессы их взаимодействия. Только в этом случае мы сможем выполнять исследования, которые помогут людям.

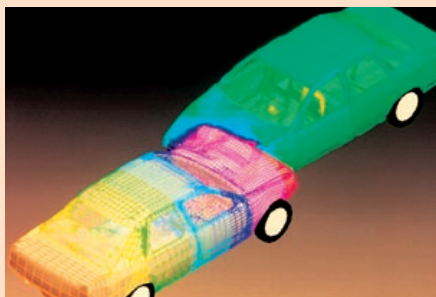
Области применения компьютерного моделирования



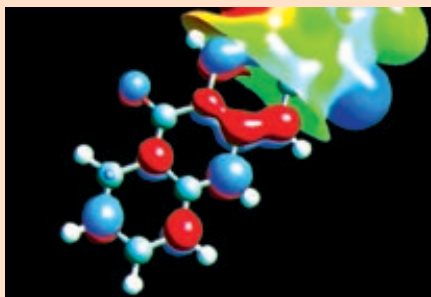
Архитектура: трехмерное моделирование зданий и городских районов, в данном случае проектирование вокзала в Штутгарте



Астрофизика: виртуальные эксперименты и проверка теорий; оценка спутниковых данных



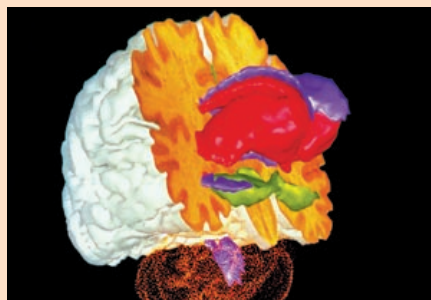
Автомобилестроение: моделирование аварийных ситуаций; конструирование новых моделей на компьютере



Химическая промышленность: создание искусственных материалов и исследование свойств веществ



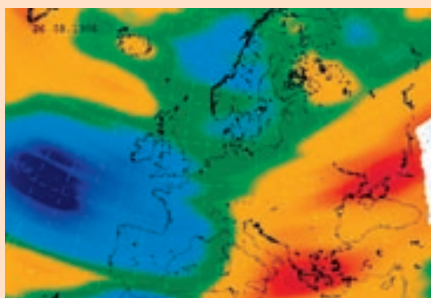
Воздушные и космические полеты: характеристики обтекания и конструкций; моделирование условий полета



Медицина: вспомогательное средство при диагностике болезней и проведении различных операций



Мода: виртуальные показы мод на компьютерном подиуме и проектирование одежды



Погода и климат: модели для исследования климатических изменений; прогнозирование погоды

ет о следующем проекте — он хочет исследовать биологические системы. В настоящее время с помощью моделирования он тщательно изучает возможности борьбы против ВИЧ-вируса. Если этот проект будет успешным, то СПИД перестанет представлять угрозу для человечества.

Суперкомпьютеры могут столкнуться «черные дыры»

Такое моделирование в области астрофизики требует огромных вычислительных мощностей. Доктор Эд Зайдель (Ed Seidel) из института Альберта Эйнштейна в Потсдаме работает в институте Макса Планка по гравитационной физике над моделированием поведения «черных дыр». К сожалению, мощности компьютера от SGI, предоставленного ему в институте, не хватило. Ученые смогли продолжить свои исследования только с помощью суперкомпьютеров американского National Center for Supercomputing Applications (NCSA) в Иллинойсе, центра Конрада-Цузе (Konrad-Zuse-Zentrums) в Берлине и вычислительного центра в Гархинге (Garching).

После того, как компьютеры были объединены высокомошной сетью со скоростью передачи данных до 10 Мбит/с, программное обеспечение, созданное рабочей группой под руководством Зайделя и названное Cactus Computational Toolkit, смогло скоординировать все расчеты. Полученные результаты позволили ученым еще на один шаг приблизиться к пониманию свойств нашей Вселенной.

Теперь они напали на след так называемых гравитационных волн, которые Альберт Эйнштейн предсказал в своей общей теории относительности. В Германии, США и Италии ученые сконструировали детекторы, позволяющие отследить эти волны.

Ученые Ганновского университета совместно с сотрудниками института Альберта Эйнштейна и университета в Глазго работают над проектом под названием GEO600, с помощью которого можно будет измерить гравитационные волны. Результаты моделирования, полученные в Потсдаме, помогут ученым правильно оценить параметры будущих измерений.

Моделирование имеет неоспоримое

Двигатель прогресса — вычисления усложняются

Прорыв компьютерного моделирования в науку произошел в 80-х годах. Мощности больших вычислительных машин и программное обеспечение достигли такого уровня, что компьютерное моделирование позволило получать надежные результаты при решении проблем высокой сложности. Примером могут послужить методы Роберто Кара и Мишеля Парринелло, благодаря которым химическая промышленность смогла получить знания о создании искусственных материалов. Аэродинамические трубы и аварий-

ные испытания в автомобильной промышленности также заменяются компьютерным моделированием. Для построения многих моделей требуются большие вычислительные мощности. Например, моделирование в астрофизике возможно только при объединении усилий нескольких центров с суперкомпьютерами. С этой целью институт Альберта Эйнштейна в Потсдаме объединяется с вычислительными центрами в Берлине, Вашингтоне и штате Иллинойс.

преимущество: ученые могут свободно изменять параметры и таким образом определять их влияние на модель. Независимо от того, работают ли они над струйным принтером или «черными дырами», компьютерная модель позволяет понять всю систему в целом.

Однако и эксперимент еще не изжил себя. О его значении говорит Эд Зай-

дель: «Без эксперимента можно легко потерять ориентацию, в результате чего полученная модель уведет в неправильном направлении». Правда, при этом возникает проблема: чаще всего экстремальные значения температуры или давления создаются только в течение долей секунды, например, при инициировании атомного взрыва.

Так как вычислительные мощности компьютеров постоянно растут, то в будущем моделирование займет более крепкие позиции, нежели сейчас. Поэтому уже в настоящее время обучение студентов в университетах ориентируется на будущее. Росс Аллен считает: «Мы готовим уже не химиков, а инженеров-компьютерщиков».

Сегодня — исследования, а завтра — повседневность

Рвение ученых, поддерживаемое компьютерной техникой, оказывает более сильное влияние на наши будни, чем кажется. Благодаря моделированию материалов возникли не только пластмассы. В фармацевтике ученые исследуют воздействие медикаментов на организм

человека. В исследовательских лабораториях компании Форда, занимающихся конструированием автомобилей, ученые с помощью программного обеспечения Роберто Кара и Мишеля Парринелло изучают свойства поверхностей из алюминия. Производитель шин Pirelli исследует, какие вещества в черной резине обеспечат лучшее сцепление автопокрышки с поверхностью дороги. Разработчики электрооборудования ищут оптимальный материал для создания оболочки силовых кабелей.

Список научно-исследовательских институтов и предприятий, которые с помощью программного обеспечения изучают свойства материалов и разрабатывают новые продукты, велик. И это вполне оправдано — даже несущественные улучшения имеют огромное воздействие на производство.

Харальд Фетте



Др. Эд Зайдель,
институт Альберта Эйнштейна в Потсдаме

«Проблемы науки настолько сложны, что их можно решить только с использованием мощных суперкомпьютеров»

INFO • INFO • INFO

Подробнее о моделировании

Институт Макса Планка в Штуттгарте:
www.mpi-stuttgart.mpg.de

Институт Альберта Эйнштейна в Потсдаме:
<http://jean-luc.aei-potsdam.mpg.de>

Анимация по теме гравитационных волн и «черных дыр»:
<http://jean-luc.aei-potsdam.mpg.de/movies>

CHIP-CD 7/99 На CHIP-CD находится анимационное представление столкновения нейтронных звезд и «черных дыр» (alphalso.mpg). Результаты получены институтом Альберта Эйнштейна в Потсдаме. Кроме того, на CHIP-CD приведены картинки по визуальному отображению гравитационных волн.