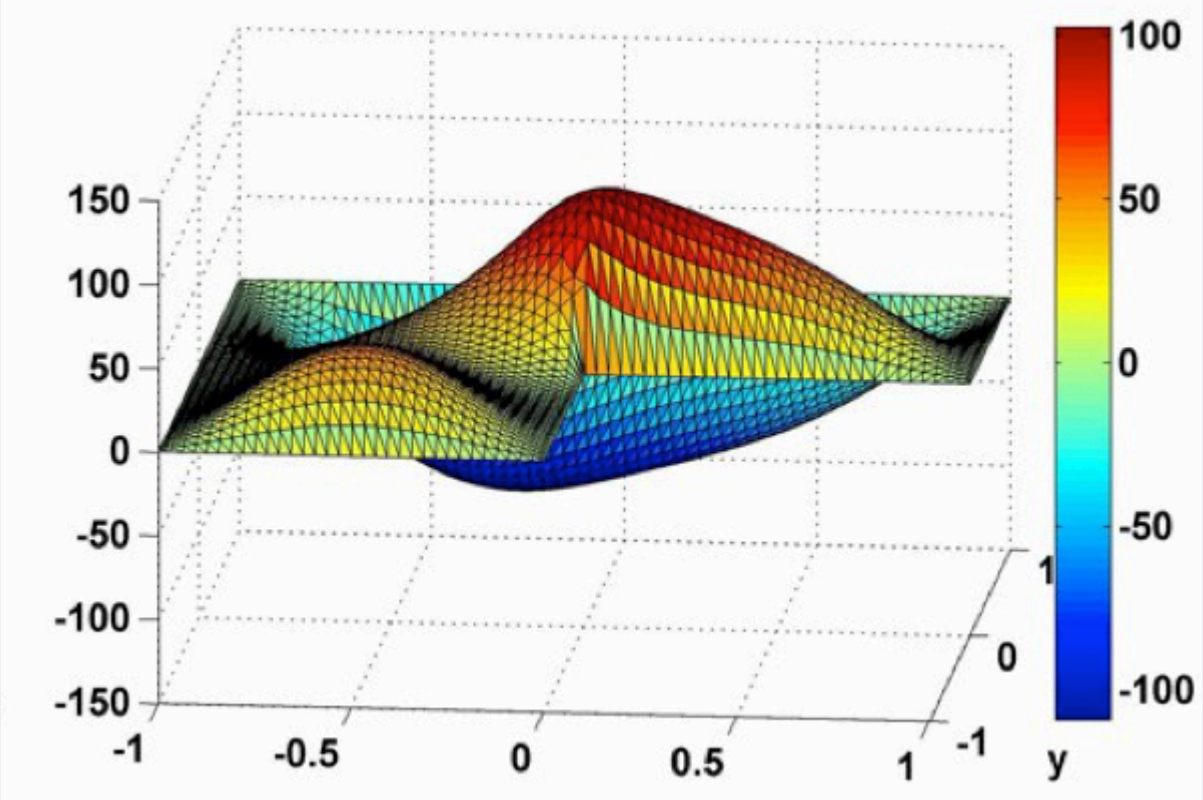
А мы пойдем другим путем: российский подход к апостериорной оценке



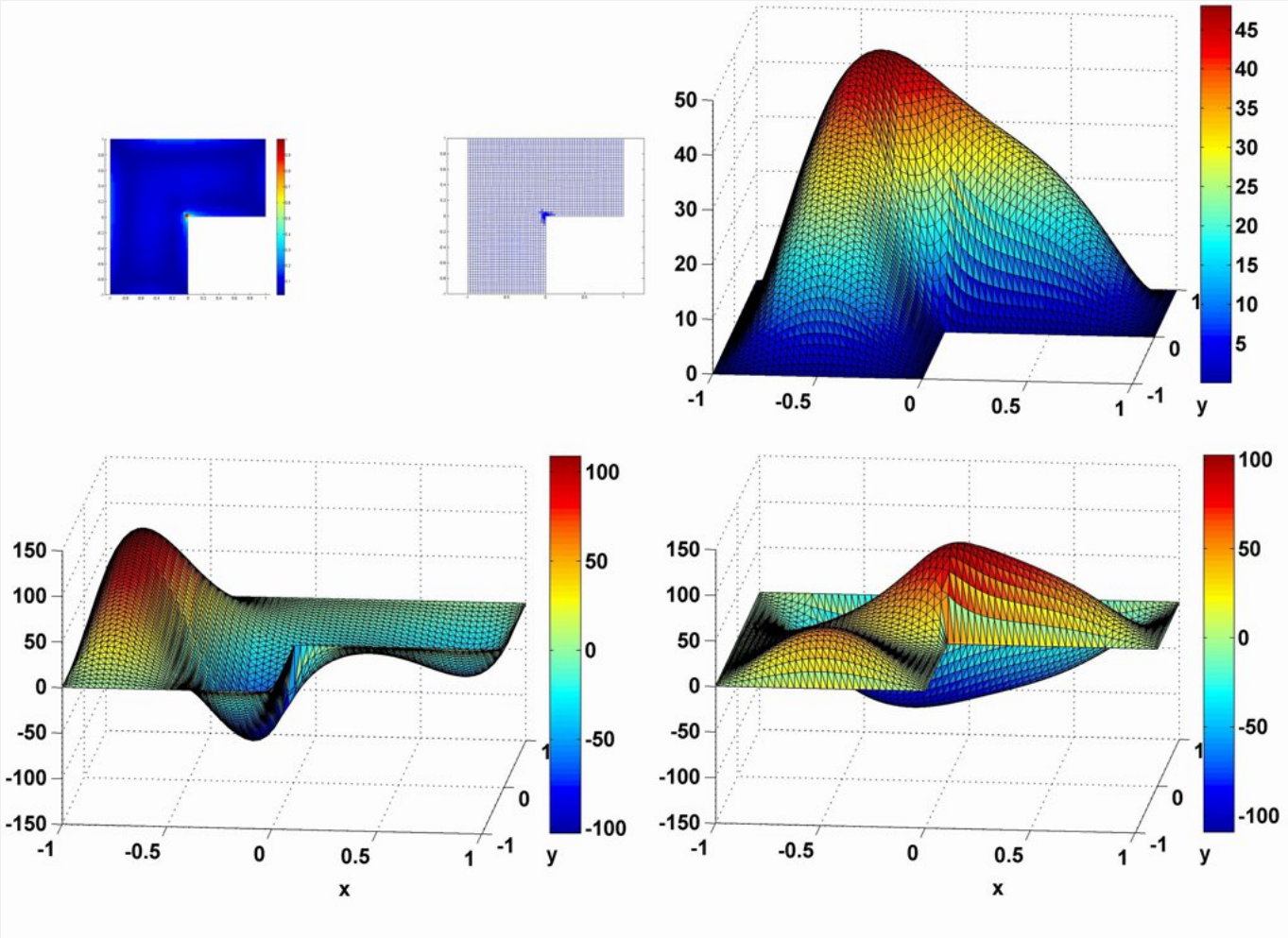
В конце 2016 года были объявлены результаты престижного конкурса грантов Президента РФ для государственной поддержки молодых ученых. В число победителей-докторов наук вошел директор института прикладной математики и механики, заведующий кафедрой «Прикладная математика» ***Максим Евгеньевич Фролов****, который получил президентский грант на создание адаптивных методов решения задач механики с гарантированной точностью, основанных на применении апостериорных оценок. В связи с этим мы рассказываем о тематике проекта, новаторском пути России в этом направлении и непростой, но интересной научной жизни ученых, исследующих данную тему.*

Что такое апостериорная оценка

При проектировании, строительстве или решении каких-либо промышленных задач необходимо создать **математическую модель**, наглядно демонстрирующую механизмы работы, воздействие тех или иных факторов на объект и т.д. Таким образом, вычисляются решения, которые прогнозируют те или иные процессы: как, например, поведут себя конкретные части конструкции после воздействия температуры/нагрузок/столкновения и т.д. При анализе задач механики, возникающих в промышленности, необходимо **контролировать точность решений**, иметь возможность оценить процент погрешности. Для этого и применяется **апостериорная оценка** — оценка погрешности решения в рамках построенной приближенной модели.

Существуют коммерческие пакеты (например, ANSYS), в которых уже заложены методы решения различных задач. Однако возможность контролировать точность **при отсутствии экспериментов** в них существует лишь для самых простых моделей. Хотя даже здесь могут возникнуть затруднения при использовании коммерческого пакета. Например, даже если рассмотреть классическую задачу об изгибе пластины, при этом неверно выбрать параметры вычислительной схемы, может возникнуть погрешность там, где совершенно не ждешь, и точность решения простейшей задачи будет не 95 %, а 60% или меньше. Что уж тогда говорить о математическом моделировании в сложных междисциплинарных задачах, где анализируются эффекты разной природы и масштабов и их взаимодействие. Таким образом, либо необходим эксперт, который может увидеть, чему не стоит доверять, либо остается доверять «картинке», полученной по результатам расчета.

Как правило, результаты **вычислительного эксперимента** сравниваются с результатами **физического эксперимента** (в простых случаях — с известным аналитическим решением). Заказчики проводят эксперименты для того, чтобы проще было спрогнозировать решения и провести расчеты: вот, например, при таких-то параметрах задачи и материала получаем такие-то прогибы в пластинах. Без эксперимента оценить адекватность математической модели, построенной в коммерческом пакете, невозможно, так как не с чем сравнивать. Таким образом, возникает вопрос: **что делать там, где нет возможности провести эксперимент, но необходимо оценить решение задачи** или, экономя ресурсы, адаптировать процесс вычисления решения под особенности рассматриваемой задачи? А вот это уже совсем другая история...



Другая история

Немного отмотаем назад: [redacted] датированы 1978-м годом — после этого пошел вал научных статей, исследующих данную тематику. Таким образом, эта наука развивается на Западе очень активно с 80-х годов, в России же в силу известных причин произошло некоторое отставание, в результате которого мало кто из отечественных ученых заинтересовался этим направлением. Позже нужно уже было либо вливаться в поток научных исканий в рамках, сформировавшихся к середине 90-х годов подходов, либо предлагать **новый подход**.

Как уже было сказано выше, существующие коммерческие пакеты не предназначены для надежной оценки точности решений. Все дело в том, что **взгляды на апостериорную оценку** у математиков и инженеров **несколько расходятся**. Если максимально упрощать, то задача большинства современных подходов звучит примерно так: «даже если решение исходной задачи потребует существенных ресурсов, то оценить его точность желательно быстро и простым методом».

Зародившийся же в России подход наоборот сосредотачивается на **математических методах, связанных именно с надежной оценкой точности** тех или иных решений. Первая работа на эту тему вышла в 1996 году, хотя фундаментальный подход к решению проблемы апостериорного контроля точности предлагался еще в работах советского математика Соломона Григорьевича Михлина. По мнению последователей подхода, математические свойства тех задач, которые возникают при оценке погрешностей, существенно сложнее, чем свойства исходных задач, а соответственно требуют особого внимания. Основоположником направления, развиваемого сейчас, является [redacted] — когда-то выпускник, а теперь профессор кафедры «Прикладная математика» Политеха, а также главный научный сотрудник Санкт-Петербургского отделения Математического института им. В.А. Стеклова РАН. Он с относительно небольшой научной группой и по сей день продолжает активно работать над совместными исследованиями, в том числе, со своим бывшим учеником, а теперь коллегой — директором института прикладной математики и механики СПбПУ **Максимом Фроловым**. Эта работа — пример плодотворного сотрудничества Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и учреждений Российской Академии наук.

Суть подхода заключается в том, чтобы **независимо от того, как проводились расчеты, оценить точность решения и предложить варианты дальнейших действий**. При невозможности провести физический эксперимент оценка точности решения в рамках математической модели пришлась бы как раз кстати. Без этого невозможно понять, насколько адекватна эта модель и соответствует реальности. Правда, говорить о проверке точности решений задач особой сложности, вроде скоростного деформирования, как при краш-тесте, или турбулентного течения, говорить еще рано. Данный метод только в начале своего пути, но об этом позже.

Проблема контроля точности не только чисто математическая, но еще и философская: когда мы моделируем что-то, можем ли мы доверять этому моделированию, если точность самого расчета никак не проверена? И наоборот: можем ли мы гарантировать «правильность» модели, игнорируя при этом возможную погрешность приближенного решения?

«Оценка точности должна быть такой, что, не зная ничего про решение задачи и даже **не имея результатов эксперимента**, мы имели бы возможность эту точность решения абстрактной задачи оценить. По сути это звучит немножко фантастически» — делится Фролов. По его словам, даже для коллег-механиков, решающих прикладные задачи, данный подход кажется неочевидным — как оценивать погрешность вычисленного решения, не зная исходного точного (аналитического)? Поэтому и методы тривиальными быть не могут.

Западные коллеги к данным исследованиям относятся с уважением, но иногда с критикой и недоверием. Несмотря на это, у «немейнстримного» подхода есть и единомышленники — коллеги из Финляндии, Австрии, Чехии и Швейцарии, которые принимают участие в разработке методов. Различия в методах построения апостериорных оценок ученый объясняет еще и тем, что предложенный Репиным подход носит фундаментальный характер, а за рубежом эта наука в основном развивалась людьми с инженерным взглядом на проблему. В этом плане важно совместить лучшие стороны разных походов и, в идеале, сэкономить при этом вычислительные ресурсы, не потеряв в надежности результатов. А для этого нужно, чтобы методы решения были адаптивными, когда аппроксимация, которая там используется, сама адаптировалась под ту задачу, которая решается.

А теперь про грант

Начиная с 2006 года, Максим Фролов участвовал в нескольких грантах РФФИ в качестве исполнителя, а в 2014-2015 гг. — был руководителем такого гранта для молодых ученых, но эти проекты носили более фундаментальный характер. Сегодня же, президентский грант — это еще один **шаг от фундаментальной науки в сторону прикладной**, который поможет перекинуть мостик в сторону промышленного применения.

Сложность работы в рамках гранта и заключается как раз в переходе от теории к практике. С одной стороны, сама оценка, при помощи которой контролируется точность — это некая **математическая структура**, неравенство. Одно дело его получить на бумаге, а другое — сделать применимым на практике, для чего нужно посчитать оценку и сделать это эффективно.

В ходе работы ученым необходимо разработать математические методы, предложить и обосновать вычислительным экспериментом эффективные алгоритмы их реализации и по итогам создать код, который при промышленном применении позволит более точно и надежно считать решения для различных задач с удовлетворяющей нас точностью, но за меньшее время. Создание таких средств поможет **независимо контролировать результаты**, которые мы получаем при помощи тех же коммерческих пакетов.

Трудности заключаются еще и в том, что работа многоуровневая и очень трудоемкая, а прямые аналоги отсутствуют и сравнивать не с чем. Ошибку можно допустить на каждом этапе, поэтому если в итоге оценка точности выглядит непригодной для практического использования, то необходимо пересматривать и методы, и алгоритмы реализации, и запрограммированный код.

> *«У меня было такое, что я потратил 2,5 года на достижение результата — пробовал реализовать одну из интересных оценок для задач теории упругости. Сначала результат получился неудовлетворительный. В поиске возможных ошибок прошло полтора года, пока я понял, что надо взять другую оценку из монографии С.И. Репина 2008 года и другим методом ее реализовать, то есть пришлось откатиться назад [и начать заново]. И сейчас мы с коллегами продолжаем исследования в этом направлении, получены **новые теоретические результаты**, уже несколько классов задач удалось успешно рассмотреть благодаря решению той. Два с половиной года ты тратишь на результат без всяких гарантий, но зато потом полученный опыт дает целую россыпь возможностей продолжения близких исследований. Но пока сидишь и мучаешься, думаешь, стоит оно того или нет. Конечно, сложно, не видя света в конце тоннеля, продолжать идти. Я, видимо, очень упрямый».*

На сегодняшний день благодаря сотрудничеству Политеха и ПОМИ им. В. А. Стеклова РАН такое актуальное в мире направление, как **разработка надежных адаптивных алгоритмов на основе апостериорных оценок**, получило развитие в России и может выйти на более высокий уровень. Однако по прогнозам Максима Фролова, заметно продвинуться в исследованиях возможно при более высоком финансировании, привлечении компаний, занимающихся разработкой наукоемкого софта при коллективе из 20-25 сотрудников (а сейчас, помимо руководителя, в проекте участвует 3-е молодых ученых), — тогда есть шанс создать импортозамещающий код.

Как говорит Фролов, компетентные кадры есть — родная кафедра прикладной математики готовит именно таких специалистов, каких надо, но реалии таковы, что они, как правило, и так уже очень сильно востребованы и в IT-индустрии, и в хоздоговорных работах — лучшие студенты вовлечены в деятельность, которая имеет более быструю отдачу. Например, один из крупных проектов по разработке специализированного программного обеспечения потребовал интенсивной работы большого коллектива разработчиков в течение трех лет с суммарным уровнем финансирования несколько десятков миллионов рублей. Размер **президентского гранта** 1 миллион в год. «Для меня эта победа — большая честь как для ученого и возможность продвинуться в сторону того, чтобы заинтересовать студентов и привлечь новые кадры, но изначально конкурировать с IT такой проект не может — он скорее для тех, кто **хочет и готов заниматься наукой**.» — Подводит итог Фролов.

Татьяна Иванова

Информационно-аналитический центр