

Profesor dr hab. inż. Tadeusz Burczyński
Członek korespondent PAN
Dyrektor Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN

Modelowanie i symulacja komputerowa jako kluczowy element współczesnej metodologii badań naukowych

Wstęp

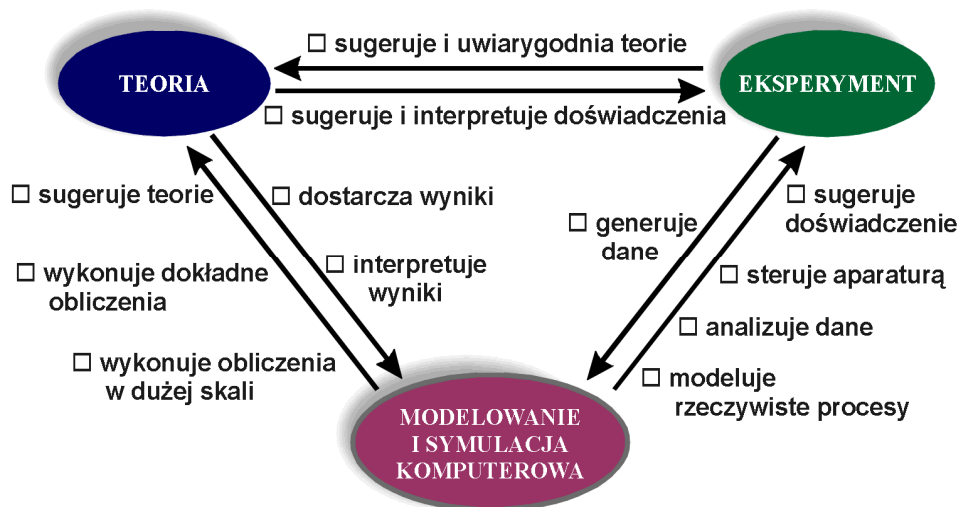
Przez ostatnie dekady społeczność związana z nauką i techniką stawała się coraz bardziej świadoma faktu, że symulacje komputerowe są nieodzownym i koniecznym narzędziem stosowanym do rozwiązywania bardzo wielu problemów naukowych i inżynierskich pojawiających się w społeczeństwie i gospodarce. Aby zdefiniować obszar zainteresowań badań naukowych opartych na symulacji komputerowej oraz ocenić ich wpływ na ważne dyscypliny nauki i techniki, przedstawiono w wykładzie próbę określenia wyzwań i potencjalnych korzyści z rozwoju tego podejścia oraz barier w ich rozwoju.

1. Wprowadzenie

Pojęcie słowa „symulacja komputerowa” odnosi się do stosowania modeli obliczeniowych w analizie i predykcji procesów fizycznych lub zachowań systemów technicznych. Rozwój symulacji komputerowej wyłania się jako efekt współdziałania i rozwoju wiedzy oraz metodologii nauk matematycznych, przyrodniczych, obliczeniowych i technicznych. Symulacja komputerowa wraz z rozwojem i szerokim zakresem zastosowań staje się w ostatnich latach potężnym narzędziem, mogącym zrewolucjonizować naukę i technikę w XXI wieku.

Modelowanie i symulacja komputerowa reprezentują takie rozszerzenie zakresu nauk teoretycznych, że uzyskanie nowych rezultatów poznawczych bazuje głównie na modelach matematycznych. Takie modele opisują zjawiska fizyczne oraz są podstawą teorii naukowych. Jednakże symulacja może być czymś więcej, np. może być używana do badania nowych teorii i projektowania nowych eksperymentów testujących te teorie. Symulacja może być traktowana również jako alternatywa dla technik eksperymentalnych i obserwacyjnych, gdy zjawiska są trudno obserwowalne lub zbyt kosztowne. Prowadzi to do śmiałej konkluzji, że

przy obecnym rozwoju technik komputerowych oprócz TEORII i EKSPERYMENTU wyróżnić można trzeci filar nauki – SYMULACJĘ KOMPUTEROWĄ (rys. 1) (por. [Kleiber 1999]).



Rys. 1 Modelowanie i symulacja komputerowa jako trzeci filar nauki

Modelowanie i symulacja komputerowa związane są z badaniami, w których dominującym i zasadniczym elementem metodycznym uzyskiwania nowych rezultatów poznawczych lub aplikacyjnych jest użycie technik komputerowych, już istniejących lub opracowanych, przy czym techniki komputerowe nie tylko wspomagają rozwiązywanie tradycyjnie postawionych problemów, ale także tworzą bazę umożliwiającą stawianie zupełnie nowych problemów badawczych.

Modelowanie i symulacja komputerowa mogą być zdefiniowane jako rodzaj interdyscyplinarnej dziedziny naukowej, która dostarcza naukową podstawę dla symulacji zjawisk fizycznych oraz systemów technicznych. Przez systemy techniczne rozumie się tutaj obszar pojęciowy rozciągający się od urządzeń mikroelektronicznych do pojazdów, samolotów, a nawet infrastruktury miast. Modelowanie i symulacja komputerowa spajają wiedzę i techniki tradycyjnych obszarów inżynierii – elektrycznej, mechanicznej, lądowej, chemicznej, kosmicznej, jądrowej, biomedycznej i materiałowej – z wiedzą i technikami z takich obszarów jak: informatyka (nauki informacyjne), matematyka oraz nauki fizyczne, chemiczne i społeczne. Rezultatem stosowania modelowania i symulacji komputerowej są efekty predykcji i optymalizacji systemów, przede wszystkim technicznych, które wywierają wpływ na wszystkie aspekty ludzkiej pracy i życia, włączając w to środowisko, bezpieczeństwo oraz wytwory, które są produkowane, sprzedawane i użytkowane.

Mimo że stosowanie symulacji komputerowych w naukach technicznych datuje się już od pół wieku, to w ostatnich dwóch dekadach teoria i technologia symulacji komputerowych niezwykle silnie wywiera wpływ na różne aspekty i obszary życia. Tak istotna zmiana zachodzi głównie ze względu na znaczący rozwój nauk komputerowych i obliczeniowych oraz szybkiego postępu w budowie sprzętu (hardware) i oprogramowania (software) komputerowego. Są również inne powody rozwoju takiego podejścia. Wiele współczesnych technologii znajduje się na granicy poznania, co sprawia, że są one trudne do zrozumienia, rozwijania i stosowania bez wykorzystania symulacji. Wiele z tych technologii może mieć istotne znaczenie dla szybkiego rozwoju Polski, opartego na wiedzy w wielu obszarach nauki i techniki. Modelowanie i symulacja komputerowa stają się zatem nieodzownym elementem zapewnienia bezpieczeństwa i pomyślności kraju.

W niniejszym wykładzie analizuje się wpływ postępów w rozwoju modelowania i symulacji komputerowej na naukę i technikę oraz identyfikuje się wyzwania i bariery, jakie stoją na drodze do przyszłych osiągnięć w tym obszarze. Wskazuje się przykładowo, że należy przezwyciężyć trudności nieodłącznie związane z modelowaniem wieloskalowym, rozwijać nowe algorytmy, projektować i implementować aplikacje sterowane dynamicznie danymi itd. Należy również poprawić metody zarządzania wiedzą niepewną oraz metody walidacji i weryfikacji modeli. Zwraca się uwagę na lepsze rozwiązania prowadzące do integracji obliczeń dużej skali, wizualizacji oraz symulacji. Bardzo ważne jest również przeprowadzenie reorganizacji systemu edukacji, aby kształcić interdyscyplinarnie, co jest podstawowym wymaganiem modelowania i symulacji komputerowej. Korzyści powstałe z podjęcia tych wyzwań są bardzo liczne. Oczekuje się znacznego postępu w takich obszarach, jak: medycyna i biologia, inżynieria materiałowa, bezpieczeństwo narodowe, wytwarzanie, projektowanie inżynierskie oraz w wielu innych.

Przez ostatnie lata polskie środowiska naukowe, zwłaszcza z obszaru nauk ścisłych i technicznych, formułowały wielokrotnie przekonanie, że nauki obliczeniowe mogą stworzyć przesłanki do zapewnienia bezpieczeństwa i dobrobytu Polski. Wnioski i rekomendacje zawarte w tym wykładzie silnie wzmacniają to przekonanie.

Główne wnioski, jakie sformułowano, sprowadzają się do trzech ogólnych konkluzji:

- modelowanie i symulacja komputerowa to interdyscyplinarna dziedzina nieodzowna dla rozwoju nauki i techniki w Polsce i jej znaczenia w Europie i na świecie. Zajmuje miejsce centralne w: biomedycynie, naukach technicznych, wytwarzaniu i bezpieczeństwie narodowym. Można uzasadnić, że rozwój tej nowej dyscypliny znacząco wpłynie na każdy aspekt ludzkiej aktywności;

- na drodze rozwoju modelowania i symulacji komputerowej stoją potężne wyzwania, które wymagają rozwiązywania wielu problemów z zakresu modelowania wieloskalowego i wielopolowego (pola sprzężone), integracji w czasie rzeczywistym metod symulacji i systemów pomiarowych, walidacji i weryfikacji modeli, operowania dużymi zbiorami danych oraz wizualizacji. Niezwykle ważne jest również to, że jednym z tych wyzwań jest edukacja inżynierów i badaczy nowej generacji w obszarze badań podstawowych i stosowanych modelowania i symulacji komputerowej;
- istnieje silne przeświadczenie, że pozycja Polski w wielu obszarach nauki i techniki będzie znacząca i silna, jeśli rozwinięte będą obszary związane z modelowaniem i symulacją komputerową. Współzawodniczące w wyścigu naukowym i technologicznym narody całego świata zwiększają swoje inwestycje w obszarze badań naukowych, podczas gdy w Polsce można zauważyć stały regres nakładów oraz zmniejszenie względnego postępu naukowego w porównaniu z USA oraz innymi krajami Europy i Azji. Odwrócenie tego trendu wymaga zmian w systemie edukacyjnym, jak również w finansowaniu nowych badań naukowych w Polsce.

2. Modelowanie i symulacja komputerowa jako priorytet dla nauki i techniki

Stały postęp, który może przyczynić się do poprawy stanu zdrowia społeczeństwa, bezpieczeństwa Polski, a także spowodować, że kraj stanie się konkurencyjny, musi zostać poprzedzony zmianami w sposobie prowadzenia badań naukowych, w strukturach i systemie edukacyjnym oraz w przewyżczeniu wielu innych trudności. Dla techniki postęp w badaniach opartych na symulacjach komputerowych wydaje się mieć bardzo duże korzyści. Korzyści te muszą zostać poprzedzone rozwojem badań podstawowych z zakresu nauk związanych z modelowaniem, symulacją i obliczeniami.

W wykładzie podjęta będzie próba opisanie tej dziedziny wiedzy, rozważając kolejno korzyści, jakie ona ze sobą niesie, przeszkody i możliwości jej rozwoju, jej wpływ na narodowy program badań naukowych, zasoby, cele i strukturę organizacyjną systemu edukacji. Przedstawione będą także wnioski oraz zalecenia z przeprowadzonych badań, analiz i dyskusji.

Rzadko się zdarza tak, że wyniki wielu badań dochodzą do zgodnych konkluzji, które prowadzą do stwierdzenia, że modelowanie i symulacje komputerowe mają potężny wpływ na rozwój nauki i techniki, a także na rozwiązywanie wielu problemów społecznych. Warto odnieść się tutaj do dwóch raportów opracowanych w USA [Raport 2006], [Raport 2008] oraz raportu opracowywanego przez autora dla European Community on Computational Methods in Applied Sciences

(ECCOMAS) [Burczyński 2010], potwierdzających sformułowane wnioski i podkreślających znaczenie i rolę symulacji oraz modelowania komputerowego we współczesnej nauce, technice, edukacji i gospodarce.

Niniejszy wykład dołącza się do tych głosów, które w specjalny sposób podkreślają rolę nauki i techniki, oraz do wyzwań cywilizacyjnych jako głównego beneficjenta badań o symulacji komputerowych.

Wykorzystanie potencjału, jaki niosą ze sobą modelowanie i symulacje komputerowe, wymaga rewolucji w technologii symulacji. Badań opartych na symulacjach komputerowych nie należy rozumieć jako „zwykłych symulacji”, są to raczej badania skupione na zagadnieniach modelowania i symulacji złożonych, współzależnych systemów technicznych i ekonomicznych oraz zjawisk fizycznych, chemicznych, biologicznych oraz procesów społecznych. Rezultaty takich badań wymagają stosowania specjalnych procedur związanych z oceną ich dokładności i pewności oraz niezawodności. Dodatkowo opisywana dziedzina zawiera znacznie więcej niż tylko modelowanie systemów, zjawisk i procesów, rozwija nowe metody, techniki, procedury i strategie planowania. Nie tylko stymuluje postępy w rozumieniu naukowym, lecz kapitalizuje ten postęp przez bezpośrednie ich stosowanie do rozwiązywania problemów i stawiania czoła wyzwaniom bezpośrednio należącym do obszaru nauki i techniki. Przykładowo, odkrycia w tym obszarze będą mieć bezpośrednie zastosowanie w optymalizacji, sterowaniu, zarządzaniu wiedzą niepewną, weryfikacji, walidacji, podejmowaniu decyzji, nawet w czasie rzeczywistym. W skrócie, ta dziedzina wiedzy podnosi symulacje na wyższy poziom, gdzie istnieje nadzieja na rozwiązanie wielu trudnych, nierozwiązanych jeszcze problemów modelowania, projektowania inżynierskiego, wytwarzania i badań naukowych. W szczególności dotyczy to rozwoju nowych technologii i nowych odkryć naukowych.

W jakich obszarach takie podejście może spowodować przełom? Wydaje się, że sprawą nieulegającą wątpliwości będzie olbrzymie znaczenie tej dziedziny wiedzy w następujących obszarach:

- rozumienie i sterowanie zjawiskami wieloskalowymi (multiscale) i wielopoloowymi (multiphysics),
- fundamentalny rozwój w nanotechnologii, biomedycynie, inżynierii materiałowej, energii i środowisku, naukach o ziemi i o życiu,
- znaczące wzmoczenie dokładności i użyteczności prognoz obliczeniowych,
- rozwój w wielu obszarach inżynierii z bezpośrednim przełożeniem na poprawę jakości życia, zdrowia, bezpieczeństwa, konkurencyjności i bogactwa Polski.

Aby osiągnąć te cele, należy również pokonać wiele barier i przeszkód. Należy zatem:

- zrewolucjonizować obecne wyobrażenie o symulacji komputerowej i jej stosowaniu przez nauczenie się wykorzystywania nowych odkryć upraszczających i wyjaśniających komputerowe symulacje wieloskalowe i wielopolowe,
- uczynić znaczące postępy w technologiach wspierających modelowanie i symulacje komputerowe, czyli w obliczeniach dużej skali, metodach zarządzania danymi oraz algorytmach,
- przeprowadzić przegląd systemu edukacji, aby przystosować go do potrzeb tej dziedziny wiedzy w zakresie badań naukowych i nauczania,
- zmienić sposób finansowania i prowadzenia badań naukowych w Polsce.

Do tej pory postępy w obszarze symulacji komputerowych bazowały głównie na postępkach w zakresie sprzętu (hardware) i oprogramowania (software), co stanowi domenę klasycznie rozumianej informatyki, mikroelektroniki i technologii informacyjnych. Z tego powodu symulacje komputerowe stały się efektywnymi narzędziami w tradycyjnej praktyce naukowej i inżynierskiej. W przeciwieństwie do teorii, która zajmuje się ograniczonymi, wyidealizowanymi systemami, symulacja dotyczy problemów systemów rzeczywistych oraz unika ograniczeń eksperymentu i testu, które najczęściej dotyczą kosztów, nierealistycznych zakresów parametrów oraz ich wpływu na zdrowie i środowisko. Z tych powodów symulacje komputerowe święciły triumf w XX wieku w takich dziedzinach jak: przemysł motoryzacyjny (crash-testy), prognozy pogody i zmiany klimatu, produkcja przemysłowa, biomedycyna i bioinżynieria, systemy obronne, komunikacyjne i transportowe oraz wiele innych.

Kluczem do tych sukcesów są nadal metodologie symulacji, które są obecnie już przestarzałe lub mało efektywne, aby spełnić wymagania nowych technologii. W wielu przypadkach osiągnięte sukcesy w symulacjach komputerowych z poprzedniego stulecia są największymi przeszkodami w uzyskiwaniu sukcesów dziś i w przyszłości. Dawna wiedza, metody i praktyka hamują rozwój nowych narzędzi i metod.

W Polsce nauki obliczeniowe rozwijane były od wielu lat. Warto wspomnieć o dużych tradycjach uczonych polskich lub polskiego pochodzenia (prof. O.C. Zienkiewicz, Doktor Honoris Causa Politechniki Śląskiej), którzy rozwijali metody komputerowe w mechanice i inżynierii lądowej. Bardzo silne są tradycje mechaniki obliczeniowej, która była rozwijana w Polsce od początku lat siedemdziesiątych ubiegłego wieku, choć można zauważyć, że obecnie ta pozycja jest silnie zagrożona.

Konkurenci światowi również zdają sobie sprawę z olbrzymiego potencjału, jaki niosą ze sobą symulacje komputerowe. W USA, a także w wielu krajach Europy i Azji rządy podejmują wielkie inwestycje w obszary badawcze z zakresu obliczeń, matematycznego i komputerowego modelowania, algorytmów, sieci kompu-

terowych oraz ogólnie obliczeniowych nauk podstawowych i stosowanych. Kraje te podejmują, na osiągniętym już fundamencie nauk obliczeniowych, nowe wyzwania, które są bardzo istotne dla rozwoju technologii, a co stwarza przesłanki do ich dalszej przewagi ekonomicznej.

Od 1988 roku kraje Europy Zachodniej wygenerowały więcej artykułów naukowych z obszaru nauki i inżynierii niż USA, a całkowity wzrost liczby artykułów naukowych jest największy we Wschodniej Azji (492%), Japonii (67%) i Europie (59%). Niski jest wskaźnik cytowań prac naukowych dla Polski. W Niemczech 36% absolwentów studiów wyższych uzyskuje stopień zawodowy lub naukowy z zakresu nauk ścisłych i technicznych, w Chinach 59%, w Japonii 66%.

Globalny eksport Polski w zakresie wysokich technologii jest bardzo niski, a bilans handlowy dla polskich produktów wysokiej technologii jest ujemny.

Kluczem do przezwyciężenia tych trudności jest osiągnięcie znacznego postępu w rozwoju i zastosowaniu symulacji komputerowych w nauce i technice. Polska powinna być w awangardzie krajów, które podejmują znaczący wysiłek zmierzający do tego, aby ten obszar wiedzy rozwijał się dynamicznie. Należy rozszerzyć możliwości symulacji komputerowych do obszaru zastosowań związanego z coraz bardziej złożonymi systemami i procesami, wraz z akwizycją danych w czasie rzeczywistym. Symulacje komputerowe nie mogą już stanowić marginesu umiejętności absolwentów uczelni wyższych, ale muszą stanowić trzon ich wykształcenia zawodowego.

Należy integrować symulacje komputerowe z nauczaniem techniki i praktyką inżynierską, co wymaga potężnych zasobów intelektualnych i narodowej zgody. Wyniki takich działań z pewnością przełożą się na takie obszary technologii jak: mikroelektronika, zaawansowane materiały, bio- i nanotechnologia, farmacja, medycyna, obrona narodowa i bezpieczeństwo.

Podsumowując znaczenie modelowania i symulacji komputerowej, jako priorytetu badań wynikłych z wyzwań cywilizacyjnych Polski, należy stwierdzić, że:

- rzadko się zdarza, że tak wiele niezależnych badań i ekspertyz prowadzi do podobnych konkluzji, że symulacja komputerowa to kluczowy element realizacji postępu w nauce i technice,
- ta dziedzina wiedzy ustanawia nowy paradygmat, który będzie nieodzowny dla wyzwań stojących na styku nauka – technika w XXI wieku,
- symulacja komputerowa stała się nieodzowna w metodach przewidywania pogody, zmian klimatu i zachowania się atmosfery oraz, co oczywiste, w szerokich obszarach związanych z analizą i syntezą techniczną,
- znaczenie i wielki potencjał symulacji nie może zostać niezauważony przez inne kraje Europy i świata.

3. Efekt i korzyści badań opartych na symulacjach komputerowych: zastosowania wspierające dynamiczny rozwój kraju

3.1. Medycyna i biologia

Większość chorób i sposobów ich leczenia wywołuje złożone chemiczne i fizyczne reakcje i interakcje między systemami biologicznymi, od skali molekuł do skali organów. Metody symulacji mogą znacząco podnieść poziom zrozumienia przyczyn chorób oraz metod ich leczenia, co może również prowadzić do udoskonalania tych metod. Nauki obliczeniowe są obecnie stosowane w wielu obszarach nauk biologicznych, w szczególności w genetyce i immunologii. Obecne wyzwanie, to zastosowanie ich w medycynie klinicznej oraz studia nad systemami biologicznymi na poziomie komórkowym, tkankowym i w skali całych organów i narządów.

Praktyka inżynierska ma wiele wspólnego z medycyną – opiera się na rozwiązywaniu problemów i rozumieniu złożonych systemów. Proces projektowania inżynierskiego bazuje na przewidywaniu rezultatów. Często rozwiązania inżynierskie wymagają spełnienia wielu kryteriów jednocześnie (wielokryterialność), co wymusza przeprowadzanie analiz i optymalizacji komputerowych. Historycznie rzecz biorąc, paradygmat medycyny to kombinacja diagnozy i empirii – testy diagnozują stan i pewne warunki, na podstawie których planuje się leczenie, bazując na danych empirycznych i własnym doświadczeniu.

Medycyna oparta na symulacjach komputerowych to nowe podejście w praktyce medycznej. Ta nowa metodologia przyczynia się już do wielkiego postępu w analizie obrazów medycznych i obliczeniach wielkiej skali, co daje praktyce medycznej narzędzia nowoczesnej inżynierii, np. obecnie można przeprowadzać wstępne symulacje z wykorzystaniem osobniczych (związanych z konkretnym pacjentem) danych anatomicznych i fizjologicznych, aby przewidywać rezultaty procedur leczniczych, a dzięki temu projektować optymalne leczenie dla indywidualnych pacjentów, co stanowi pasjonujące nowe możliwości w medycynie (np. symulacji projektowanej operacji wszczepienia bypassów, stosowane narzędzia: obraz rezonansu magnetycznego, model geometryczny, analiza przepływu krwi, model obrazu pooperacyjnego; wspomaganie decyzji doboru rodzaju i typu endoprotez stawu biodrowego za pomocą systemów ekspertowych).

Istnieje również możliwość symulacji działania urządzeń medycznych na wirtualnych pacjentach, z równoczesnym zniesieniem barier anatomicznych i fizjologicznych, z wykorzystaniem metod wirtualnego prototypowania, przez symulacje zabiegów z wykorzystaniem różnych wariantów urządzeń i typów pacjentów. Takie ujęcie sprawia, że uzyskuje się wirtualne testy kliniczne poprzedzające testy na zwierzętach i ludziach, co prowadzi do redukcji kosztów, zwiększenia bezpieczeństwa, efektywności narzędzi i skrócenia czasu od projektowania urządzeń do ich

sprzedaży (np. przestrzenny model serca uzyskany poprzez zastosowanie metody elementów skończonych).

Kolejna grupa potencjalnych beneficjentów osiągnięć, to przedstawiciele przemysłu farmaceutycznego i biotechnologii. W tych obszarach metody symulacji mogą pomóc w modelowaniu procesów transportu leków w układzie krążenia i oddechowym oraz w wyznaczeniu lokalnych koncentracji leków z wykorzystaniem farmakokinetycznych modeli metabolizmu leków (np. stenty z lekami, lokalna chemioterapia, inhalanty terapeutyczne).

Inne ważne zagadnienie to badania nad nowotworami, w szczególności w zakresie komórkowych mechanizmów adhezji i inwazji oraz tzw. szlaków sygnałowych. Lepsze rozumienie tych zjawisk będzie pomocne w badaniach nad rakiem i jego neurobiologią. Rozwój technologii wieloskalowych w modelowaniu i symulacjach komputerowych w zakresie struktur komórkowych i mechaniki komórek, tak jak rozwój nowych urządzeń do pomiaru sił komórkowych, pomoże wyjaśnić dynamikę struktur komórkowych oraz zdolność poruszania się komórek. Aby zrozumieć to ostatnie zjawisko, najpierw należy rozumieć mechanikę wnętrza komórki, a następnie mechanikę macierzy zewnątrzkomórkowej, ze szczególnym uwzględnieniem sił. Te złożone mechanizmy determinują kształt komórki i migrację, co pozwala na pełnienie przez komórki ich krytycznych funkcji, takich jak ich znaczenie w procesie gojenia ran i morfogenezy embrionalnej. Rozumienie tych procesów pozwoli np. lepiej rozróżniać komórki nowotworowe od innych. Stawka jest duża, ponieważ inwazja zmienionych komórek do innych tkanek (metastaza) jest prekursorem rozwoju tkanek nowotworowych.

Innym, bardzo ciekawym i użytecznym obszarem jest bioinformatyka, jako interdyscyplinarna dziedzina nauki, obejmująca wykorzystanie metod obliczeniowych do badania danych biologicznych. Obejmuje ona rozwój metod obliczeniowych służących do badania struktury, funkcji i ewolucji genów, białek i całych genomów oraz rozwój metod wykorzystywanych do zarządzania i analizy informacji biologicznej gromadzonej w toku badań genomicznych. Przykładami takich zastosowań jest analiza komputerowa mikromacierzy DNA.

Podsumowując powyższe rozważania, należy stwierdzić, że program rozwoju modelowania komputerowego prowadzi do rozwoju nowego ujęcia w praktyce medycznej i biologii, nazywanego roboczo medycyną i biologią obliczeniową lub medycyną i biologią opartą na symulacjach komputerowych.

3.2. Nauki techniczne

Technologie mogą mieć największe znaczenie cywilizacyjne wtedy, gdy innowacje w modelowaniu i metodologii symulacji krzyżują się z innowacjami w zakresie nowych materiałów i konstrukcji. Modelowanie i symulacje wieloskalowe zmieniają naukę i technologię rozwoju nowych materiałów i konstrukcji oraz poprawiają istniejące systemy techniczne. Taka zmiana jest równoważna transformacji w kierunku nowego paradygmatu nauk technicznych. Nowe metody umożliwią projektowanie nowych materiałów metalicznych, ceramicznych, półprzewodnikowych, supramolekularnych i polimerowych. Rezultatem stosowania tych metod będą struktury materiałów oraz urządzenia posiadające niezwykle własności fizyczne, chemiczne, elektroniczne, optyczne i magnetyczne. Można obecnie przewidywać projektowanie molekularne materiałów kompozytowych o niezwyklej funkcjonalności. Ponadto, aby uzyskać istotne korzyści wynikające z technologii bazujących na modelowaniu i symulacjach komputerowych w rozwoju nowych materiałów, badacze z wielu dyscyplin są zmuszeni integrować swoją wiedzę z wiedzą nauki o materiałach. Taka współpraca maksymalizuje możliwości rozwoju materiałów o dużym znaczeniu technologicznym.

Zasadą nowoczesnego projektowania materiału i konstrukcji jest rozumienie korelacji między strukturą molekularną i własnościami fizycznymi a zadaniami, jakie musi spełniać konstrukcja. Na podstawie tej korelacji mogą być formułowane modele, które przewidują ewolucję mikrostruktury. Takie modele pozwalają również badać mechanizmy wyjaśniające krytyczne zachowania materiałów i konstrukcji oraz w sposób systematyczny poprawiają metody projektowania.

Użycie symulacji komputerowych do nieznanych korelacji struktura – własności – konstrukcja może mieć pierwszorzędne znaczenie zwłaszcza w sytuacjach, gdy opieramy się tylko na danych eksperymentalnych. Wynika to z faktu, iż symulacja komputerowa umożliwia uzyskanie szczegółowych informacji odnoszących się do projektowanej mikrostruktury przez całościowe sterowanie warunkami początkowymi i brzegowymi konstrukcji. Innym ważnym aspektem jest fakt, że możliwa jest analiza i optymalizacja z uwzględnieniem wielu skal czasowych i przestrzennych. Wielki postęp został uzyskany również w obliczeniach w skali nano, umożliwiające analizę zjawisk na poziomie atomowym. Obecny postęp, jakiego jesteśmy świadkami, dokonuje się poprzez łączenie różnych technik obliczeniowych w analizie i optymalizacji zjawisk fizycznych w materiałach i konstrukcji przebiegających jednocześnie w nano – mikro – mezo – makro skalach.

Duże korzyści z rozwoju nowych materiałów wynikają z uwzględnienia postępu w nanotechnologii i nanonauce. Ze względu na wieloskalową naturę modelowania i symulacji materiałów, modelowanie i symulacje komputerowe pełnią kluczową rolę w nanonauce. Możliwe jest łączenie metod opartych na mechanice

kwantowej, które są niezbędne dla projektowania własności funkcjonalnych i nanostrukturalnych, z technikami mikro- i mesoskalowymi. To połączenie zapewnia, że różne fazy innowacyjnego rozwoju materiałów – od projektowania do badania i użytkowania oraz obliczeń cyklu życia produktu – mogą być symulowane, testowane i optymalizowane.

Zdecydowana zaleta obliczeń wieloskalowych może być pokazana w szerokich zastosowaniach, które dotyczą rozumienia zachowań znanych materiałów w ekstremalnych warunkach. Przykładowo, problem, który zajmuje uwagę badaczy od wielu lat, to charakterystyka mechanicznego zachowania się materiału podczas deformacji plastycznych w obecności wysokich ciśnień i dużych prędkości odkształceń. To wyzwanie wymaga zaangażowania metod symulacji wieloskalowych poprzez obliczenia na poziomie atomowym rdzeni dyslokacji, modelowanie ruchu dyslokacji z wykorzystaniem symulacji metodą dynamiki molekularnej, wyznaczenie relacji konstytutywnych dla poziomu mikro – mezo modeli kontynualnych. Symulacje wieloskalowe mogą być również bardzo użyteczne w zagadnieniach projektowania nowych elementów konstrukcji urządzeń energetyki, zwłaszcza reaktorów jądrowych. Takie konstrukcje nie tylko muszą być odporne na promieniowanie radioaktywne, lecz również muszą mieć cykl użytkowania na poziomie kilkudziesięciu lat.

Nawet jeśli materiały nie muszą pracować w tak ekstremalnych warunkach, jak duże ciśnienia czy promieniowanie radioaktywne, obszar rozwoju inżynierii materiałowej jest pełen wyzwań dotyczących rozumienia mikrostruktur materiałów. Poprzez podjęcie tych wyzwań można osiągnąć wiele korzyści, np. budując molekularne modele używanych materiałów budowlanych. Takie modele mogą również pomóc w rozwoju nowych materiałów, posiadających większą odporność na pęcznienie i odporność na wpływy środowiska. Podobnie, modele mogą pomóc w poprawie własności katalitycznych ogniw paliwowych, stosowanych w pojazdach elektrycznych. Ze wszystkich tych przykładów można wysnuć wniosek, że rozwój i poprawa własności materiałów mają kluczowe znaczenie.

Gdziekolwiek nie spojrzeć, istnieją problemy ważne dla społeczeństwa, które wymagają optymalizacji funkcjonalnych własności materiałów i konstrukcji przez sterowanie ich mikrostrukturą. Modelowanie i symulacje komputerowe będą mieć długookresowy wpływ na innowacje w tym obszarze. W szczególności następujące cechy prowadzą do takiej konkluzji:

- wyjątkowa rozległość – modelowanie materiałów i konstrukcji oraz ich symulacja komputerowa łączą różne obszary fizyki, chemii oraz nauk technicznych. Ta uniwersalność reprezentuje nowy paradygmat przejawiający się w fakcie, że tradycyjne bariery między dyscyplinami naukowymi zanikają i wszystko, co się liczy, to „potrzeba dowiedzenia się”;

- eliminacja empiryzmu – zaleta modelowania wieloskalowego jest taka, że rezultaty modelowania i symulacji komputerowej są pojęciowo i operacyjnie przedstawiane w sposób ilościowy; w konsekwencji założenia empiryczne mogą być sukcesywnie zastępowane przez rzeczywisty opis fizyczny; opis ilościowy pozwala badaczom na dokładne zbadanie i uzupełnienie każdej części modelu i symulacji w sterowany sposób; umożliwia to badania złożonych zjawisk i systemów poprzez równoczesną analizę wszystkich najważniejszych ich cech przebiegających w różnych skalach czasowych i przestrzennych,
- wizualizacja zjawisk – numeryczne wyjścia z procesu symulacji to, ogólnie rzecz biorąc, dane charakteryzujące stopnie swobody modelu; dostęp do tego typu danych pozwala nie tylko na przeprowadzenie bezpośredniej animacji, ale również pozwala na wizualizację własności będących przedmiotem analizy, własności, które mogą nie być dostępne w czasie obserwacji eksperymentalnych; przykładowo, w mikroskopii można otrzymać informacje o strukturze, ale bez informacji o energii; przez symulację można otrzymać obie te informacje; to samo można powiedzieć o danych opisujących mechanizmy deformacji i ścieżki reakcji chemicznych.

Wymienione cechy modelowania i symulacji komputerowej oczywiście nie ograniczają się tylko do rozwoju nowych materiałów i konstrukcji. Mogą być one stosowane równorzędnie w różnych obszarach nauk technicznych. Konkluzja, jaka wyłania się z tych rozważań wskazuje, że zacierą się różnica między mechaniką obliczeniową i obliczeniową inżynierią materiałową z jednej strony, a z drugiej między fizyką i chemią obliczeniową.

3.3. Bezpieczeństwo narodowe

Nowoczesne projektowanie inżynierskie w zagadnieniach bezpieczeństwa prowadzić powinno do rozwoju systemów, które chronią ludzi oraz wspierają infrastrukturę. Systemy te chronią przed wieloma zagrożeniami: wojennymi (terroryzm), środowiskowymi (skażenie wody i powietrza) oraz naturalnymi (ostre zimy, powodzie, huragany, trzęsienia ziemi). Wspomniane systemy muszą chronić infrastrukturę: budynki, systemy transportowe, żywność, wodę, systemy energetyczne, komunikacyjne oraz gospodarkę odpadami.

Modelowanie i symulacje komputerowe mogą odgrywać istotną rolę w projektowaniu i optymalizacji tych systemów zabezpieczających. Pozwalają przewidzieć nie tylko konsekwencje działań niebezpiecznych (atak chemiczny lub biologiczny), ale również zaprojektować środki zaradcze. Za pomocą prognoz opartych na symulacjach komputerowych będzie można projektować i optymalizować infrastrukturę odporną na szeroki zakres zagrożeń. Wraz ze zdolnością do prowadzenia

symulacji w czasie rzeczywistym sztaby kryzysowe będą zdolne do bardziej racjonalnych rozwiązań w sytuacjach kryzysowych.

Może to dać inżynierom i planistom nowe szerokie spojrzenie operacyjne na systemy, które dotyczą społeczeństwa, np. można imitować operacje w skali całych miast, rozumianych jako pojedyncze złożone systemy. Modele umożliwiają integrację wieloskalowych symulacji wielu podsystemów i procesów, takich jak odpowiadzi konstrukcji budowlanych, procesy transportu zanieczyszczeń, dystrybucja energii, działanie systemów transportowych i reakcja społeczeństw na zagrożenia.

Wizja „cyfrowego miasta” będzie wymagała akwizycji danych na poziomie szczegółowości, który dotychczas nie był stosowany. Systemy nie będą zbierały tylko danych statycznych, dotyczących infrastruktury, również będą zbierane dane dynamiczne, podlegające ciągłym zmianom. Można tu wyróżnić ciągle pomiary koncentracji zanieczyszczeń w wodzie i powietrzu, przepływy wody, powietrza i ścieków przemysłowych, lokalizację i prędkości środków transportowych i innych ruchomych zasobów (pociągi) oraz gęstości i ruchy ludności i samochodów.

Logicznym rozszerzeniem koncepcji „miasta cyfrowego” jest koncepcja „cyfrowego ekosystemu”, który może być systemem sztucznym (miasta) lub naturalnym (las, dział wodny, kontynent lub nawet planeta). Niezależnie od skali, korzyści są takie same – następuje wzmocnienie zdolności do optymalizacji ludzkiej aktywności oraz infrastruktur ze względu na niepomyślne zdarzenia lub trendy. Za pomocą symulacji w czasie rzeczywistym będzie można identyfikować i projektować racjonalne odpowiedzi na kryzysy.

Koncepcje i metody modelowania i symulacji komputerowych dają nadzieję na zrewolucjonizowanie praktyki planowania urbanistycznego, transportu, inżynierii środowiska i konstrukcji, zarządzania miastem i środowiskiem. Aby zrealizować wizję „cyfrowego miasta i ekosystemu”, należy uznać, że wiele badań z tym związanych musi mieć charakter pionierski.

Wiele obszarów wymaga dalszego rozwoju:

- dalszy rozwój modeli ilościowych procesów symulowanych; niektóre z nich już istnieją od dawna: modele konstrukcji, modele dynamiki płynów, modele spalania (rozprzestrzenianie się ognia), modele transportu (ruch uliczny); dla pewnej grupy procesów modele mają jednak charakter elementarny lub w ogóle nie istnieją, zaliczyć można tutaj modele socjologiczne odpowiedzi populacji na kryzys czy modele ewolucji naturalnych ekosystemów, jak lasy i jeziora;
- wymagany jest rozwój kompleksowych systemów symulacji obejmujących zjawiska w szerokim zakresie skal; wspomniane systemy będą wymagały analizy złożonych systemów wieloskalowych, często zorientowanych problemowo;
- będą wymagane nowe modele o wyjątkowej wierności odtworzenia analizowanego fragmentu rzeczywistości; rozwój i walidacja takich modeli pociągają za

sobą zbieranie danych o niezwyklej dokładności; rezultat takich działań to fakt, że rozwój koncepcji miast i ekosystemów cyfrowych będzie w nieunikniony sposób wymuszał presję na badania eksperymentalne i teoretyczne, które będą również wymagały tych danych; ponadto symulacje w czasie rzeczywistym będą wymagały rozwoju narzędzi sensorycznych i infrastruktury komunikacyjnej; to wszystko wiąże się z analizą danych, co więcej będzie wymagany rozwój systemów, które będą adaptacyjnie dopasowywały się do napływających strumieni danych;

- wymagany jest również rozwój rozumienia znaczenia pojęcia niepewności; pewien poziom niepewności jest nieunikniony, jeśli chodzi o zdolność modelu do odzwierciedlenia rzeczywistości i wykorzystania danych używanych przez model; należy znaleźć sposoby interpretowania niepewności, aby charakteryzować jej efekty w ocenie prawdopodobnych rezultatów stosowania modeli i ich symulacji.

Korzyści wynikające z podjęcia tych wyzwań są bardzo duże. Nastąpi wzmocnienie bezpieczeństwa i udogodnień życia w „cyfrowym mieście” i „cyfrowym ekosystemie”, co spowoduje powstanie infrastruktury społecznej o najwyższej sprawności, dającej racjonalne odpowiedzi na naturalne lub nagłe zdarzenia oraz optymalnie współdziałającej ze środowiskiem naturalnym.

Do najważniejszych zastosowań modelowania i symulacji komputerowych w opisywanym obszarze należą:

- ochrona przed zanieczyszczeniami powietrza – technologie symulacji komputerowych będą wykrywały i mierzyły obecność zanieczyszczeń biologicznych i chemicznych w powietrzu, a mając dokładne dane pogodowe, będą w stanie przewidzieć sposób przemieszczania się zanieczyszczeń i ich wielkość; systemy będą również pozwalały na projektowanie optymalnych planów przeciwdziałania rozprzestrzenianiu się zanieczyszczeń;
- optymalizacja infrastruktury – modelowanie i symulacje komputerowe umożliwią optymalizację projektowanych budynków i innych elementów infrastruktury, które będą z jednej strony specyficzne, niepowtarzalne, a z drugiej będą właściwie współdziałały ze sztucznym i naturalnym otoczeniem, łącząc je i tworząc wspólnie system miejski; dodatkowo będą zdolne uwzględniać efekty działań, zarówno zamierzonych, jak i zagrożeń różnej skali;
- prognozowanie długookresowego wpływu na środowisko – technologie symulacji komputerowych będą zdolne przewidywać i opisywać efekty istnienia ścieków oraz ich wpływ na miasto i środowisko naturalne, zmniejszając prawdopodobieństwo nieprzewidzianych zdarzeń;
- optymalizacja odpowiedzi na zagrożenia, takie jak pożary, eksplozje; zagrożenia wynikające ze zmian pogodowych; także planowanie działań może uwzględniać

ewolucję i eskalację zdarzeń (zawalenie się budynku, rozprzestrzenienie się pożaru);

- optymalizacja infrastruktury bezpieczeństwa środowiska miejskiego – technologie symulacji komputerowych pozwolą na projektowanie rozmieszczenia czujników zanieczyszczeń powietrza i wody oraz pomogą w planowaniu akcji im przeciwdziałających, związanych z rozprzestrzenianiem się zanieczyszczeń, np. podczas powodzi.

Podsumowując, należy stwierdzić, że modelowanie i symulacje komputerowe umożliwią predykcję konsekwencji zagrożeń oraz będą pomocne w zaproponowaniu środków przeciwdziałającym im.

3.4. Zastosowania przemysłowe i obronne

Przed symulacją komputerową stoją ogromne możliwości zastosowań w przemyśle. Odgrywa ona podstawową rolę w projektowaniu materiałów i konstrukcji, procesów wytwarzania i produktów. Coraz częściej symulacja zastępuje doświadczalne testy zapewniające produktom niezawodność i jakość. Mniej testów to mniej prototypów, a także uzyskanie rezultatów w krótszym cyklu projektowania. Redukowanie cykli projektowania ma kluczowe znaczenie w świecie ciągłej konkurencji, w którym dotrzymanie kroku konsumentom nowych produktów staje się ważniejsze z każdym dniem. Potrzeba krótszych cykli projektowych jest również niezbędna w przemyśle związanym z bezpieczeństwem narodowym. Zdarzenia w świecie są zwykle nieprzewidywalne, przemysł zbrojeniowy i obronny Polski powinien być zdolny do projektowania, modyfikowania i wytwarzania wyposażenia, zdolnego do szybkich odpowiedzi na krytyczne położenie militarne.

Użycie symulacji komputerowych stało się efektywne w wielu zastosowaniach przemysłowych. Dla przykładu, testy zderzeniowe zastępuje się obecnie z powodzeniem symulacjami komputerowymi. Badania symulacyjne odgrywały dotąd główną rolę w ważnych zastosowaniach związanych z projektowaniem przemysłowym i obronnym. Jednakże symulacji komputerowych w wielkiej skali nie wprowadzano do tej pory we wczesnych fazach procesu projektowania. Przygotowanie modeli, na końcu cyklu projektowania, wymaga znacznego czasu i pracy. Często przygotowanie modelu trwa miesiące i nawet wtedy model potrzebuje kalibracji z wynikami testów, jeśli projekt znacznie różni się od poprzednich koncepcji.

Dodatkowo przygotowanie modelu wymaga zwykle znacznej wiedzy i umiejętności z zakresu metod komputerowych, takich jak np. metody elementów skończonych. Z tego powodu ciężar przygotowania modelu spada zwykle na inżynierów z wyższymi kwalifikacjami, a nie na projektantów. To rozdzielanie między symulacją komputerową i projektowaniem przejawia się w opóźnieniach i niewykorzystaniu w pełni zalet i skuteczności symulacji komputerowych.

Trudności występujące w stosowaniu symulacji są złożone, gdy podczas projektowania wytworu występują nowe materiały (kompozyty i stopy). Wówczas, zanim nawet zastosuje się symulację komputerową, nowe materiały muszą być gruntownie przetestowane, celem wyznaczenia ich własności. Takie testy wymagają wiele czasu, co wydłuża czas i zwiększa koszty przeprowadzenia użytecznych symulacji.

Dodatkowo możliwości symulacji komputerowych są obecnie ograniczone, ze względu na brak możliwości modelowania wszystkich zjawisk. Przykładowo, w symulacji zderzenia tylnego dwóch samochodów byłoby pożądanym, aby modelować paliwo w zbiorniku oraz efekty występowania pęknięć w zbiorniku. Tak zaawansowane symulacje wielopolowe nie są obecnie jeszcze możliwe. Podobnie ciągle są jeszcze kłopoty z modelowaniem pęknięcia wewnętrznych paneli i wyposażenia samochodów podczas zderzeń, co jest szczególnie istotne przy ocenie bezpieczeństwa pasażerów. Dlatego technologie symulacji testów zderzeniowych są zwykle używane, aby sprawdzić projekty blisko ich finalnego stanu. Optymalizacja projektów dla celów testów zderzeniowych w początkowych stadiach procesu projektowania jest w zasadzie jeszcze niewykonalna. Złożoność procesu generacji modelu i występowanie niepewności są zbyt duże. Nawet wtedy, gdy przemysł zastępuje testowanie doświadczalne symulacjami komputerowymi, zmiany będą ciągle wymagały odpornych procedur weryfikacji i walidacji, aby zapewnić efektywność narzędzi symulacji.

Podobne ograniczenia pojawiają się w wielu innych zastosowaniach przemysłowych, gdzie nawet minimalne zastosowanie symulacji komputerowych traktowane jest jako sukces. Przykładowo, w symulacji procesu wytlaczania ważne zjawisko, jakim jest tarcie między metalem a matrycą, nie zawsze jest modelowane właściwie. Te zjawiska są charakteryzowane przez znacznie mniejsze skale niż cały proces i są poddane dużej zmienności, ponieważ zależą od takich czynników jak temperatura i stan środka smarnego. W przemyśle oponiarskim symulacja jest zwykle ograniczona do wyznaczenia odcisku opony. Inne ważne charakterystyki, takie jak wpływ wybojów, poślizg na wodzie i przy skręcie, nie mogą być symulowane, ponieważ wymagają podejścia wielopolowego z wykorzystaniem wielu skal czasowych i przestrzennych.

W przemyśle chemicznym symulacje komputerowe mogą pełnić poważną rolę. W zasadzie większość urządzeń petrochemicznych projektuje się z wykorzystaniem modeli i symulacji dla stanów ustalonych, aby przeprowadzać szczegółową optymalizację w czasie rzeczywistym. W rezultacie urządzenia chemiczne są efektywniejsze pod względem energetycznym i środowiskowym. Jednak nawet w przemyśle chemicznym użycie symulacji jest jednak ograniczone. Obecnie stosowane modele nie uwzględniają przebiegu procesów w wielu skalach i nie są wrażliwe na występowanie niepewności.

W przemyśle elektronicznym rola symulacji komputerowych jest także nie do przecenienia. Wytwarzanie obwodów scalonych oraz tranzystorów nowej generacji, a także innych urządzeń bazujących na obliczeniach kwantowych, wymaga podstaw fizycznych łączących mechanikę kwantową i elektromagnetyzm.

Symulacja komputerowa może pełnić w przemyśle bardzo ważną rolę, ale obecnie istnieje wiele ograniczeń w jej stosowaniu i wykorzystywaniu:

- rozwój modeli wymaga dużo czasu, w szczególności dla geometrii złożonych systemów inżynierskich. Ponadto wyznaczenie własności materiałowych zwykle wymaga pracochłonnych testów w małej skali, zanim symulacja może być rozpoczęta; w szczególności gdy wymaga się własności statystycznych; testowanie wydłuża czas otrzymania wyników symulacji i stąd wydłużeniu ulega również cykl projektowania;
- wymagane są metody umożliwiające łączenie modeli w różnych skalach i symulowanie złożonych sprzężonych zjawisk fizycznych; takie modele i metody symulacji komputerowych są w trakcie tworzenia;
- symulacja komputerowa jest zwykle odseparowana od procesu optymalizowania podczas projektowania i nie może równocześnie uwzględniać takich czynników jak technologiczność, koszt i wpływ na środowisko.

Przekroczenie tych barier wymaga silnego impulsu w rozwoju nowych, efektywnych i oryginalnych metod. Wśród tych nowych wyzwań są takie metody i techniki jak:

- metody wieloskalowe i wielopolowe, które obejmują szeroki zakres skal przestrzennych i czasowych oraz łączą różne typy zjawisk fizycznych;
- metody obliczeń zjawisk makroskopowych, biorących pod uwagę własności materiałów i proces wytwarzania, z uwzględnieniem zachowań w skalach niższych i sprzężenia między tymi skalami;
- metody obliczeń miękkich, uwzględniające brak precyzji danych oraz umożliwiające znajdowanie rozwiązań globalnych;
- efektywne metody optymalizacji, które uwzględniają złożoność systemów zintegrowanych, biorąc pod uwagę niepewności, i prowadzą do skutecznych metod projektowania;
- podstawy dla walidacji, weryfikacji i zarządzania wiedzą niepewną;
- metody szybkiego generowania modeli o złożonych geometriach i własnościach materiałowych.

Zastosowanie metod wieloskalowych będzie przynosiło wiele trudnych do przecenienia korzyści. Metody te umożliwiają rozumienie relacji i interakcji między zjawiskami w różnych skalach, co jest kluczowe w projektowaniu wielu wytworów. W ich projektowaniu często jest konieczne sprzęganie zjawisk o różnej naturze fizycznej, takich jak mechanika płynów, mechanika ciała stałego, termodyna-

mika, elektromagnetyzm i inne. Symulacja takich zjawisk wymaga uwzględnienia szerokiego zakresu skal. Przykładowo, modelowanie zjawisk pożarowych dla celów obronnych wymaga włączenia komponentów z różnych zjawisk i skal związanych z teorią spalania i teorią konstrukcji. Dodatkowo pojawia się problem różnych skal czasowych, które determinują zachowanie się całego systemu.

Metody wieloskalowe umożliwiają również predykcję własności materiałowych w rozumieniu podstawowych elementów składowych struktury, obejmując własności osnowy i włókien dla materiałów kompozytowych oraz własności molekularne na poziomie atomowym w metalach. Wzrost wymagań w stosunku do materiałów oznacza w zasadzie redukcję masy i kosztów, stąd wykorzystanie narzędzi, które przez symulacje komputerowe są zdolne przewidzieć zachowanie konstrukcji na podstawie informacji o podstawowych elementach struktury materiału. Otwiera to wiele nowych możliwości dla lepszego i szybszego rozwoju tańszych i bezpieczniejszych produktów. Takie narzędzia pozwolą wyeliminować drogie testy materiałowe spowalniające proces, w rezultacie skracając czas cyklu projektowania. Metody, które powstaną, będą zdolne łączyć modele o różnych skalach, jak np. modele mikromechaniki lub nanomechaniki z modelami zachowań w skali makro.

Proces projektowania, opierający się w coraz większym stopniu na symulacji komputerowej, wymaga procedur walidacji i weryfikacji, co staje się coraz bardziej istotne. Podjęto już wysiłki, aby wprowadzić podstawy dla procesu walidacji dla problemów analiz liniowych, jednakże oprogramowanie dla symulacji nieliniowych nie uwzględnia w zasadzie procedur walidacji. Dodatkowo zauważono poważne wątpliwości odnoszące się do procedur walidacji w kontekście szerokości ich stosowania oraz w ogóle możliwości ich wykonalności. Podstawowe zrozumienie procedur walidacji i weryfikacji jest nagląco potrzebne. Aby narzędzia symulacji komputerowych używane w przemyśle były użyteczne, muszą dawać wyniki godne zaufania. Ponieważ wiele rzeczywistych zjawisk nie da się opisać w kategoriach deterministycznych, metody obliczeń miękkich i ziarnistych (soft and granular computing), uwzględniające różne modele niepewności, muszą zostać włączone w zakres rozważań symulacji komputerowych.

Projektowanie optymalne jest również w swoim początkowym etapie rozwoju oraz ma wiele przeszkód do pokonania. Ograniczenia w procesie optymalizacji projektowanych wytworów odnoszą się do technologiczności, wytrzymałości, trwałości i kosztów ekonomicznych. Optymalność często wymaga, aby była zdefiniowana za pomocą złożonych kryteriów, a baza, która jest obecnie stosowana, nie jest w zasadzie odpowiednia dla tego typu zadania. Ponadto, aby metody optymalizacji były efektywne dla projektowania inżynierskiego, muszą być blisko związane z technikami symulacji. Ciągłe brakuje podstawowego rozumienia faktu, co to jest projekt optymalny i jak go znaleźć w złożonym wielokryterialnym środowisku projektowym. Dlatego należy rozwijać takie metody optymalizacji wielokryterial-

nej, które radzą sobie z tego typu złożonością. Interesujące i obiecujące są w tym obszarze metody oparte na algorytmach ewolucyjnych i immunologicznych połączone z teorią gier.

Podsumowując, modelowanie i symulacje komputerowe mają duży potencjał, aby wspomóc proces projektowania wytworów, które są optymalne pod względem kosztów i wpływu na środowisko, a to wszystko w krótkim cyklu projektowania. Te oczekiwania nie są teraz możliwe do spełnienia, w szczególności przez proste rozszerzenie obecnych metod badań. Bariery w stosowaniu modelowania i symulacji komputerowych odnoszą się do całej drogi prowadzenia badań, rozwoju i kształcenia inżynierów.

Reasumując powyższe rozważania, należy stwierdzić, że:

- aby poprawić konkurencyjność produkowanych produktów, wymagane są krótkie cykle projektowania, które są kluczowe dla utrzymania wysokiego tempa rozwoju nowych wytworów produkowanych w kraju,
- jeśli przemysł zastępuje testowanie doświadczalne symulacją komputerową, to narzędzia symulacji muszą podlegać procedurom surowej weryfikacji i walidacji, aby sprawdzić i poprawić ich skuteczność,
- modelowanie i symulacje komputerowe mają w sobie tak silny potencjał, aby dostarczyć w krótkim okresie projektowania takie rezultaty, które są optymalne pod względem kosztów wytwarzania i całkowitego wpływu na środowisko.

3.5. Podsumowanie

Ze względu na interdyscyplinarny charakter i złożoność wyzwań stojących przed modelowaniem i symulacjami komputerowymi, krótkookresowe wysiłki badawcze o niedługim horyzoncie czasowym są niewłaściwe, jeśli planuje się osiągnąć dalekosiężne cele cywilizacyjne i technologiczne. Zamiast tego są potrzebne długookresowe programy dla badań wysokiego ryzyka, które pomogą rozwiązać wiele przeszkód pojawiających się na drodze rozwoju modelowania i symulacji komputerowych. Inwestycje krótkoterminowe przy ograniczonych strategiach planowania prowadzą do nadmiernego skupienia się na badaniach cząstkowych. Strategia badań długookresowych nad modelowaniem i symulacjami komputerowymi, mająca zapewnione finansowanie, jest konieczna dla uzyskania efektów końcowych. Ponadto postęp w tego typu badaniach wymaga utworzenia interdyscyplinarnych zespołów na styku różnych dyscyplin. Praca tych zespołów powinna mieć horyzont czasowy co najmniej dekady, aby uzyskać pełne owoce założonej inwestycji.

4. Wyzwania, bariery i możliwości

Przedstawione w poprzednim rozdziale wybrane zastosowania badań opartych na modelowaniu i symulacjach komputerowych mają jedną wspólną cechę – stoją przed nimi podobne wyzwania, bariery oraz wymagania związane z rozwojem badań naukowych. Tym zagadnieniom poświęcony jest niniejszy rozdział.

4.1. Tyrania skal – wyzwania modelowania i symulacji wieloskalowej

Uczestnictwo w wyścigu dotyczącym miniaturyzacji, nanonauki, modelowania molekularnego leków i układów biologicznych, zaawansowanych materiałów i innych zastosowań, gdzie bada się procesy na poziomie atomowym lub molekularnym, wymaga pokonania olbrzymich trudności związanych z tzw. „tyraniem skal”. Konwencjonalne metody nie radzą sobie ze zjawiskami fizycznymi mającymi miejsce w szerokim zakresie skal, np. 12 rzędów wielkości w skali czasu dla modelowania zwijania białek czy też 10 rzędów wielkości w skali przestrzennej w przypadku projektowania zaawansowanych materiałów. W takich zakresach skal potęgą tyranii skal objawia się brakiem użyteczności, w zasadzie, wszystkich metod konwencjonalnych. Zasady fizyki rządzące zjawiskami często zmieniają się wraz ze zmianą skali, stąd same modele muszą zmieniać swoją strukturę, gdy przechodzimy przez taki punkt, w którym następuje zmiana skali.

Tyrania skali nie tylko ma dominujące znaczenie podczas symulacji komputerowej na poziomie molekularnym i atomowym, ale wszędzie tam, gdzie spotyka się dużą dysproporcję w skalach czasowych i przestrzennych. Takie dysproporcje pojawiają się praktycznie we wszystkich obszarach nowoczesnej nauki i techniki, np. w astrofizyce, meteorologii, naukach o ziemi i przy projektowaniu złożonych systemów technicznych, takich jak łodzie podwodne, samoloty i silniki odrzutowe.

Wszystko to, co wiemy o wszechświecie fizycznym i o projektowaniu oraz funkcjonowaniu systemów technicznych, może zostać podzielone na wiele sposobów, w różne kategorie skal. Projektant manipulujący własnościami elektronicznymi materiałów widzi świat jako miliardy nieskończenie małych atomów z chmurami orbitujących elektronów. Meteorolog widzi świat jako ruch wielkich mas powietrza, które zmieniają na powierzchni Ziemi warunki klimatyczne na przestrzeni tysięcy kilometrów. Obecnie usiłuje się dokonywać istotnych postępów technologicznych, które nie mogą akceptować innego spojrzenia na naturę, niż przez pryzmat podziału zjawisk ze względu na uporządkowaną kategorię skal. Poszukuje się takich metod modelowania i symulacji komputerowej, które są współmierne w swoich zastosowaniach do rozległości zjawisk i które za ich pomocą są opisywane i symulowane.

Tyrani skal nie pokona się tylko przez budowę większych i szybszych komputerów. Należy przede wszystkim zmienić w sposób fundamentalny metodologię nauk ścisłych i technicznych. To może być tylko gwarantem dalszego postępu. Takie wyzwanie, o historycznym znaczeniu, jest poza możliwościami pojedynczych jednostek i dyscyplin. Konieczność przełomu w matematyce obliczeniowej oraz rozwój nowych metod modelowania zjawisk przyrodniczych w wielu skalach będzie wymagał wysiłków interdyscyplinarnych zespołów badaczy pracujących wspólnie.

Można podać przykłady, w których wstępne i często dobierane ad hoc metodologie opóźniają postęp technologiczny. Jednym z takich przykładów jest projektowanie nanourządzeń. Nanourządzenia to systemy o bardzo niewielkich masach i relatywnie dużych powierzchniach. Metody projektowania takich urządzeń muszą wykorzystywać nowe narzędzia symulacji, ponieważ proces projektowania odbywa się w skalach zbyt małych dla zachowania ważności ujęcia mechaniki ośrodków ciągłych. Inny przykład to każde zastosowanie biomedyczne, które wymaga metod łączących różne skale czasowe. Przykładem jest sekwencja zdarzeń następująca po wprowadzeniu implantu medycznego, która dotyczy interakcji między poszczególnymi cząsteczkami wody i powierzchni implantu. Pierwszy zbiór interakcji ma miejsce w sali nanosekund. Utworzona w rezultacie powłoka wodna ma wpływ na osiadające na niej później białka i inne cząsteczki. Ten drugi zbiór interakcji odbywa się w skali mikro- i milisekund. Dlatego istnieje tutaj znacząca przerwa czasowa w opisie zachowania się układu, co sprawia trudność w modelowaniu. Podobna przerwa czasowa istnieje w procesie zachowania się łańcuchów polimerów. Jest to przyczyną wielu trudności w stosowaniu obecnych metod symulacji.

Wiele ważnych zastosowań nanotechnologii jest związanych z bezpieczeństwem narodowym. W rezultacie potrzeba i pilność rozwoju narzędzi modelowania wieloskalowego ma rosnące znaczenie, np. wiadomo, że mała koncentracja chemicznych i biologicznych środków czynnych może mieć śmiertelny efekt dla wielkiej części ludzkiej populacji. Rozpoznanie takich zagrożeń musi pobudzać rozwój nowych metod ich osłabiania, jak miniaturowe inteligentne sensory, odzież ochronna i maski. Potrzeba technicznych materiałów nanostrukturalnych w zastosowaniach związanych z bezpieczeństwem narodowym, jak również z zastosowaniami w optyce i konstrukcjach inżynierskich, jest silnie zależna od rozwoju metod wieloskalowych, które uwzględniają różnorodność w skalach przestrzennych.

Ostatnie prace z modelowania wieloskalowego kładą nacisk na syntezę teorii stosowanych do różnej rozpiętości skal, jak opis kwantowy, molekularny i ciągły. Jednak większość ważnych technologicznie problemów, takich jak modelowanie turbulencji, pozostaje nierozwiązanych. Te problemy pociągają za sobą bardzo szeroki zakres skal, niepoddających się jednemu opisowi, jak teoria ośrodków

ciągłych w przypadku turbulencji. W istocie praktyczne problemy inżynierskie przepływów turbulentnych pociągają za sobą tak olbrzymi zakres skal, że nie jest obecnie możliwe ich rozwiązanie przez największe i najszybsze komputery na świecie. Jeśli założy się, że ciągły postęp w technice komputerowej następuje zgodnie z prawem Moore'a, to i tak problemy przepływów turbulentnych nie będą jeszcze rozwiązane przez wiele pokoleń. Implikacje z rozwiązania tych problemów są bardzo duże. Dlatego należy prowadzić bardzo intensywne prace badawcze z zakresu podstaw metodologicznych rozwoju modelowania wieloskalowego.

Konieczność rozwoju modelowania i symulacji wieloskalowej jest odczuwana na całym świecie. Na przestrzeni ostatnich 5 lat praktycznie każda konferencja, symposium i międzynarodowy kongres poświęcony inżynierii i naukom obliczeniowym zawierał modelowanie wieloskalowe jako ważny temat. Modelowanie wieloskalowe często było tematem kolokwiów, grup studyjnych i zaproszonych wykładów.

W ostatnich latach obserwuje się wzrastającą liczbę publikacji z zakresu fizyki, chemii, biologii i nauk technicznych, skupiających się na różnych metodach, które łączą razem modele symulacyjne z dwóch lub więcej skal, co prowadzi do rozwoju różnych podejść modelowania w wielu skalach. Niestety postęp w tym obszarze jest zbyt powolny. Wydaje się, że rzeczywisty przełom w modelowaniu wieloskalowym jest jeszcze przed nami i tylko ważne i oryginalne idee oraz koncepcje pomogą ustanowić ogólną matematyczną i obliczeniową bazę dla dalszego rozwoju metod symulacji komputerowych zjawisk wieloskalowych.

4.2. Weryfikacja, walidacja i zarządzanie wiedzą niepewną

Najważniejszym celem symulacji komputerowej jest przewidywanie zjawisk fizycznych lub zachowań systemów technicznych. Predykcje są podstawą decyzji inżynierskich. Są one często najważniejszym wyznacznikiem w projektowaniu wytworów i systemów. Mogą być bazą dla nowych odkryć naukowych oraz podstawowym czynnikiem umożliwiającym, dzięki naukom obliczeniowym, wyjście poza obszar eksperymentów fizycznych i obserwacji. Dlatego bardzo ważnym zagadnieniem jest odpowiedź na pytanie: kiedy określone decyzje mogą polegać na symulowanych wynikach zaistnienia poszczególnych zdarzeń lub zjawisk? Jak dokładne są predykcje uzyskane na podstawie symulacji komputerowych? Jaki poziom ufności można przypisywać przewidzianym rezultatom w świetle tego, co wiadomo o systemie fizycznym i modelu, który go opisuje? Wiedza związana z wyznaczaniem i kwantyfikowaniem rzetelności i pewności symulacji komputerowych oraz ich predykcji jest znana jako weryfikacja i walidacja.

Aby ocenić znaczenie i rangę ważności weryfikacji i walidacji, należy najpierw zastanowić się nad tym, co jest istotą procesu symulacji. Rozpoczynając od poję-

ciowego rozumienia pewnych zjawisk fizycznych, będących przedmiotem zainteresowania teorii naukowych je wyjaśniających, tworzony jest model matematyczny zjawiska. Model matematyczny to zbiór równań, najczęściej różniczkowych lub całkowych, nierówności, ograniczeń itd., które reprezentują abstrakcyjnie rzeczywistość i są dyktowane przez teorię charakteryzującą dane zjawisko. Model obliczeniowy jest zdyskretyzowaną aproksymacją modelu matematycznego, a jego celem jest umożliwienie implementacji komputerowej. Walidacja to proces, który wyznacza dokładność, z jaką dany model matematyczny opisuje modelowane zjawisko. Weryfikacja to proces, który wyznacza dokładność, z którą dany model obliczeniowy reprezentuje model matematyczny. Mówiąc skrótowo, walidacja odpowiada na pytanie: „czy dobre równania są rozwiązywane?”, podczas gdy weryfikacja dotyczy odpowiedzi na pytanie: „czy równania są rozwiązywane poprawnie?”.

Zagadnienia związane z weryfikacją i walidacją są ciągle w stadium rozwoju. Podstawowe definicje i zasady były tematem wielu debat w ostatnich latach, a wiele aspektów weryfikacji i walidacji pozostaje w „szarej strefie” między filozofią i nauką, subiektywną teorią decyzji, a matematyką i fizyką. Karl Popper [Popper 2002] twierdził, że teorie naukowe nie mogą podlegać walidacji. Mogą natomiast być przedmiotem falsyfikacji. Ponieważ model matematyczny zjawiska fizycznego jest formalnym wyrażeniem pewnej teorii, więc taki model nie może być nigdy właściwie zwalidowany w sensie dosłownym, może natomiast być sfalsyfikowany. Stąd, w pewnym stopniu, wszystkie procesy walidacji polegają na założonych kryteriach i metrykach wyrażających akceptację. Odpowiednio do tego osądzamy, który model jest niewłaściwy w świetle obserwacji i eksperymentów fizycznych, a kryteria tego osądu bazują na naszej wiedzy i doświadczeniu.

Zadania weryfikacji, z drugiej strony, to przedsięwzięcia matematyczne i obliczeniowe. Wymagają one wprowadzenia miary błędu, jego detekcji i kontroli, metod programowania i, co ważne, estymacji – błędu a posteriori. Podejście to jest podstawą opracowywania tzw. adaptacyjnych wersji metod komputerowych, np. adaptacyjnej metody elementów skończonych.

Najbardziej skomplikowany aspekt weryfikacji i walidacji jest związany z niepewnością danych charakteryzujących modele matematyczne zjawisk fizycznych. W pewnych przypadkach parametry definiujące model są wyznaczone podczas testów laboratoryjnych, pomiarów polowych lub obserwacji, ale mierzone wartości tych parametrów zawsze zmieniają się z próbki na próbkę, z obserwacji na obserwację. Ponadto urządzenia używane w eksperymentach do pozyskania danych mogą wprowadzać swoje własne błędy, wywołane przez pewne niekontrolowane czynniki nazywane szumem lub błędy kalibracji. Dla opisu pewnych zjawisk posiadamy bardzo mało informacji ilościowych lub nasza wiedza o przebiegającym procesie fizycznym jest niekompletna lub niedokładna.

Niepewność może być spowodowana zmiennością w danych ze względu na niemierzalne i nieznanne czynniki, jak niekompletna wiedza o fizyce zjawiska lub ze względu na wrodzoną naturę wszystkich modeli, rozumianych jako niepełne przybliżenie rzeczywistości. Te czynniki są nazywane niepewnościami subiektywnymi. Można powiedzieć, że ponieważ dane same w sobie nigdy nie mogą być ujęte ilościowo z absolutną pewnością, to w zasadzie każda niepewność jest subiektywna. Niezależnie od źródła niepewności, techniki które trzeba rozwijać, muszą ujmować niepewność ilościowo i włączać ją w metody i interpretacje predykcji uzyskanych dzięki symulacjom.

Choć metody opisu ilościowego niepewności są rozwijane od lat, ich użycie w symulacjach wielkiej skali zaledwie się rozpoczęło. Ponieważ parametry modeli mogą być często traktowane jako pola losowe, sformułowanie probabilistyczne prowadzi do jednego z podejść w opisie ilościowym niepewności, gdy proste informacje statystyczne są dostępne. Z drugiej strony, użycie modeli stochastycznych może skutkować gigantycznym wzrostem w wymaganiach dotyczących złożoności i ilości danych, ich obróbki oraz algorytmów wyszukiwania. Inne modele opisu ilościowego niepewności oparte są na arytmetyce przedziałowej, zbiorach rozmytych lub zbiorach przybliżonych. Uwzględnienie niepewności w symulacjach komputerowych, zwłaszcza w kontekście zastosowania metod inteligencji obliczeniowej, prowadzi do implementacji obliczeń miękkich oraz tzw. obliczeń granularnych (granular computing).

Rozwój niezawodnych metodologii – algorytmów, procedur pozyskiwania i zarządzania danymi, oprogramowania i teorii – dla opisu ilościowego niepewności w predykcjach komputerowych staje się jednym z najważniejszych wyzwań stojących przed rozwojem modelowania i symulacji.

Jednym z najważniejszych i najtrudniejszych zagadnień związanych ze stosowaniem symulacji komputerowych jest ocena poziomu pewności, jaki można przypisać przewidywanym результатам, w świetle tego, co wiemy o systemie fizycznym i modelu używanym do jego opisu. Należy zwrócić uwagę na to, że:

- najbardziej skomplikowanym aspektem walidacji i weryfikacji jest uwzględnienie niepewności w danych charakteryzujących modele matematyczne symulowanego zjawiska,
- korzystanie z modeli stochastycznych lub innych, opartych np. na zbiorach rozmytych, może prowadzić do gigantycznego wzrostu wymagań związanych ze złożonością, objętością, zasobami, operacjami i algorytmami wyszukiwania danych,
- w zasadzie weryfikacja i walidacja oraz zarządzanie wiedzą niepewną stanowi przedmiot badań od wielu lat, ale dalszy ich rozwój będzie miał poważny wpływ na niezawodność i użyteczność metod symulacji w przeszłości. Nowa teoria

i metody są potrzebne dla stosowania modeli stochastycznych i rozmytych oraz dla rozwoju ważnych i skutecznych metod zarządzania wiedzą niepewną. Przed weryfikacją, walidacją i zarządzaniem wiedzą niepewną stoją wyzwania oraz konieczność prowadzenia badań naukowych w sposób wyjątkowo aktywny.

4.3. Dynamiczne systemy symulacji komputerowych

Jednym z największych wyzwań stojących przed zastosowaniami badań opartych na symulacjach komputerowych, mogącym przynieść największe korzyści, jest połączenie narzędzi symulacji bezpośrednio z urządzeniami pomiarowymi celem sterowania w czasie rzeczywistym symulacją i predykcjami komputerowymi. Pewne wstępne badania z tego zakresu były podjęte w USA w postaci zastosowań tzw. dynamicznych systemów sterowania danymi. Pełny rozwój tej śmiałej, rewolucyjnej i fundamentalnie ważnej dyscypliny zabierze lata badań i potrzebuje technologicznego rozwoju.

Koncepcja ta, rozumiana jako nowy paradygmat w symulacji komputerowej, wprowadza pojęcie „symbiotycznych systemów sterowania ze sprzężeniem zwrotnym”, w których symulacje i eksperymenty współdziałają w czasie rzeczywistym, aby znacząco poprawić jakość narzędzia symulacji, jego dokładność i pewność działania.

Podstawowe elementy składowe dynamicznych systemów sterowania danymi to: (i) hierarchiczna struktura różnych modeli symulacyjnych, (ii) system gromadzenia danych ze źródeł archiwalnych i dynamicznych, (iii) algorytmy do analizy i predykcji zachowań systemu przez połączenie modeli symulacyjnych i danych, (iv) algorytmy kierowania i sterowania gromadzeniem danych i procesami walidacji modeli, (v) infrastruktura oprogramowania odpowiedzialna za generację modeli, gromadzenie danych, analizę predykcji i algorytmy sterowania.

Koncepcja ta zmienia podstawy walidacji i weryfikacji komputerowych predykcji. Już dłużej walidacja nie będzie jednokrotną operacją, polegającą na wydaniu sądu o akceptacji symulacji w oparciu o statyczny zbiór danych. Walidacja staje się częścią dynamicznego procesu sterowania, który identyfikuje i wykorzystuje braki modelu obliczeniowego oraz dynamicznie podnosi jakość i poprawia ten model. To włączenie walidacji w dynamikę modelu znacząco wzbogaca zdolność predykcji modelu i podnosi poziom ufności przewidywanych rezultatów.

Dynamiczne systemy sterowania danymi włączają dane pomiarowe do symulacji w trakcie jej wykonywania, a symulacja dynamicznie steruje procesem pomiaru. Aby wykonać takie operacje, system taki integruje obliczenia numeryczne wielkiej skali z intensywnymi obliczeniami na danych, z sensorami, obrazami, obliczeniami gridowymi i innymi urządzeniami pomiarowymi. Rozwój tej technologii wymaga nowych koncepcji w infrastrukturze oprogramowania, algorytmów,

protokołów sterowania i solverów. Przedstawiona technologia jest bardzo obiecująca i może znaleźć różnorodne zastosowania, np. w procedurach operacji chirurgicznych, kontroli zachowania się materiałów i konstrukcji, w rewitalizacji zniszczonego środowiska, w procesach wytwarzania, w zarządzaniu rezerwami paliwymi lub sterowaniem lotem.

Podsumowując powyższe rozważania, warto zwrócić uwagę na to, że:

- synergiczne i symbiotyczne pętle sprzężenia zwrotnego pomiędzy symulacjami i pomiarami mają znaczący potencjał badawczy,
- systemy i aplikacje oparte na dynamicznych danych zmieniają rozumienie pojęć walidacji i weryfikacji,
- należy podjąć badania naukowe nad efektywną integracją systemów obliczeniowych, opartych na dużej ilości danych oraz dużej liczbie sensorów i detektorów wysokiej rozdzielczości, urządzeń do analizy obrazu oraz innych urządzeń do zbierania i akwizycji danych. Potrzebne są także badania związane z obliczeniami i analizą danych pomiarowych, zbieraniem i stosowaniem danych eksperymentalnych oraz ułatwienia interakcji między modelami i metodami obliczeniowymi. Wszystko to prowadzi do adaptacyjnego dynamicznego sterowania procesem obliczeniowym.

4.4. Nowe perspektywy w oprogramowaniu symulacyjnym

Współczesne oprogramowanie inżynierskie, służące do symulacji komputerowych (najczęściej w postaci komercyjnych kodów), ma postać towaru, który sprzedawca dostarcza dla dobrze zdefiniowanych, specyficznych i niezależnych obszarów zastosowań. Okazjonalnie kody te są modyfikowane poprzez różnego rodzaju funkcjonalne rozszerzenia, jednakże wiek tych kodów jest z reguły dosyć długi. To powolne i wygodne podejście w rozwoju oprogramowania nie jest jednak w stanie sprostać nowej generacji problemów naukowych i inżynierskich, np. związanych z wieloskalowymi zagadnieniami z danymi pozyskanymi w czasie rzeczywistym i dużą ich niepewnością.

Dzisiejsza sytuacja jest trudna dla rozwoju oprogramowania i zastosowania nauk obliczeniowych. Obecne środowiska i narzędzia informatyczne zwykle nie spełniają wymagań, które są potrzebne do rozwoju oprogramowania dla złożonych interdyscyplinarnych problemów. Czas życia aplikacji z obszaru nauk obliczeniowych jest znacząco większy niż 3–5-letni cykl życia systemów komputerowych. Dodatkowo wiele spośród nowych aplikacji nie jest wystarczająco odporna i nie może być łatwo zaimplementowana na nowym sprzęcie komputerowym.

Z tych powodów istnieje potrzeba całkowicie nowego podejścia do rozwoju oprogramowania, które będzie zawierało modele i metody używane w symulacjach komputerowych. Należy zidentyfikować i rozwinąć metodologie, które będą wspie-

rać międzyoperacyjność indywidualnych komponentów oprogramowania symulacyjnego oraz umiały zintegrować je z oprogramowaniem inżynierskim następnej generacji. Poszukiwanie nowych metod i narzędzi służących do rozwoju oprogramowania inżynierskiego jest pełne trudności, wynikających z potrzeby nowych złożonych algorytmów oraz konieczności funkcjonowania w rozwijającej się różnorodności architektur projektowanych dla potrzeb obliczeń równoległych dużej skali.

Nowe programowanie służące symulacji komputerowej wymaga specjalnego stopnia odporności, efektywności i elastyczności. Oprogramowanie to nie może tylko wykonywać algorytmów symulacji, ale również powinno dynamicznie zarządzać danymi wyjściowymi, adaptacją i sterowaniem modelem. Musi również kierować systemami obserwacyjnymi i pomiarowymi, aby optymalizować zbiory używanych danych. Powinno również mieć zdolności efektywnego nawigowania pomiędzy modelami w różnych skalach oraz dostosowywać się do wielu teorii fizycznych. Ponadto powinno być wyposażone w metody skalowania, które współdziałają niezależnie z urządzeniami gromadzącymi dane.

Wiele spośród współczesnych narzędzi rozwoju oprogramowania – biblioteki (solvery dla układów równań liniowych), języki międzyoperacyjne, narzędzia do łączenia komponentów i transferu danych oraz szkielety systemów symulacyjnych – nie spełnia współczesnych wymagań i potrzeb. Aby zdefiniować rzeczywiste wymagania dla implementacji technologii symulacji komputerowych, istnieje potrzeba nowego paradygmatu rozwoju oprogramowania. Tak fundamentalna zmiana wymaga otwartego spojrzenia z zewnątrz na sposób podejścia do rozwoju oprogramowania i praktyki inżynierskiej. Zmiana ta będzie także wpływać na sposób postrzegania i nauczania technologii obliczeniowych na wyższych uczelniach. Osoby, które będą rozwijać oprogramowanie jutra, nie tylko będą musiały zmagać się z bardziej złożonymi systemami i różnorodnym sprzętem komputerowym, ale również rozumieć ważne szczegóły zastosowań tego oprogramowania.

Szybki rozwój technologii obliczeniowych wymaga integracji wiedzy z obszaru matematyki, informatyki, inżynierii i poszczególnych teorii fizycznych. Należy również zauważyć, że problematyka badań opartych na modelowaniu i symulacjach komputerowych jest umiejscowiona w części wspólnej tych dyscyplin. W tym sensie, można traktować modelowanie i symulacje komputerowe jako inter- lub superdyscyplinę naukową. Nowy paradygmat badań i rozwoju oprogramowania będzie więc wymagał interdyscyplinarnych zespołów badawczych.

Podsumowując powyższe rozważania, należy stwierdzić, że:

- większość używanego obecnie oprogramowania jest nieodpowiednia do wieloaspektowych wyzwań modelowania i symulacji komputerowych,

- nowe narzędzia programistyczne, paradygmaty i protokoły będą musiały być rozwijane, tak by oprogramowanie mogło być przenoszone między różnymi polami badań bez zbędnego duplikowania,
- do wielodyscyplinarnych zespołów tworzonych dla potrzeb badań z obszaru modelowania i symulacji komputerowych należy dołączać doświadczonych programistów, którzy będą pracowali blisko naukowców, aby rozwijać nowe oprogramowanie,
- istnieje potrzeba zupełnie nowego podejścia do rozwijania oprogramowania, które będzie zawierać modele i metody używane w modelowaniu i symulacjach komputerowych,
- twórcy nowego oprogramowania nie tylko będą musieli radzić sobie z bardzo złożonymi algorytmami, ale również rozumieć ważne szczegóły zastosowań tych algorytmów.

4.5. Symulacje oparte na dużych zbiorach danych i rola wizualizacji

Możliwości obliczeniowe spowodowały, że jesteśmy zasypani eksplozją danych. Informacja jest tworzona z szybkością eksponencjalną. Informacja cyfrowa daje ponad 90% całej wytwarzanej informacji, znacznie przewyższając to, co zapisane jest na papierze lub taśmie filmowej. Jednym z największych wyzwań nauki i techniki XXI wieku jest umiejętność zrozumienia i uczynienia efektywnym użycie zwiększającej się ilości informacji.

W środowisku inżynierii i nauk obliczeniowych u schyłku ubiegłego wieku obliczenia z wykorzystaniem wielu danych oraz obliczenia naukowe wielkiej skali stanowiły dwa odrębne obozy. Jeden odnosił się do przenoszenia, przechowywania i manipulowania dużymi zbiorami danych, a drugi implementował równoległe strategie obliczeniowe dla rozwiązywania bardzo dużych modeli obliczeniowych problemów naukowych i technicznych. Wydaje się, że era separacji już minęła. We wszystkich zastosowaniach użycie i generacja ogromnych zbiorów danych powinna być elementem integralnym. Przykładowo, opis ilościowy niepewności, kluczowy komponent symulacji komputerowych, będzie wymagał zbiorów danych o kilka rzędów wielkości większych niż te, które są używane w tradycyjnych obliczeniach deterministycznych. Koncepcja dynamicznych systemów sterowania danymi przedstawiona w p. 4.3 z definicji wymaga nowych metod, które będą szybko generować w środowiskach gridowych lub szerokopasmowych łączach duże zbiory danych. Dane te należy przechowywać, udostępniać i transferować. Stąd powstaje kwestia interpretacji rezultatów samej symulacji jako problemu, który wynika z tworzenia gigantycznych zbiorów danych. Dlatego sprawa wizualizacji staje się jednym z najważniejszych narzędzi. Możliwości wizualizacji będą miały drama-

tyczny wpływ na badania naukowe, biomedyczne i techniczne, obronę i bezpieczeństwo narodowe oraz innowacje przemysłowe.

Główną przyczyną, dla której wizualizacja ma tak wielkie znaczenie, są wzrokowe zdolności percepcyjne człowieka, umożliwiające interpretowanie modeli złożonych zjawisk, takich jak wielopoziomowe modele ludzkiej fizjologii: od łańcuchów DNA do całych organów, wieloletnie zmiany klimatu lub wielowymiarowe symulacje opływu skrzydła przez strugi powietrza czy też w kryminalistyce przy laserowym skanowaniu miejsca przestępstwa techniką 3D.

Wizualizacja redukuje i odświeża strumienie danych szybko i ekonomicznie, stąd pozwala na przesiewanie dużych zbiorów danych – jest to własność ważna dla zastosowań takich jak nadzór nad zdrowiem publicznym na poziomie regionalnym lub narodowym, aby śledzić rozprzestrzenianie się infekcji. Wizualizacja w rozwiązywaniu problemów w takich zastosowaniach jak dynamika huraganów i bezpieczeństwo narodowe tworzy nową wiedzę, która jest na przecięciu tradycyjnych dyscyplin.

Wizualizacja pozwala ludziom obejmować wzrokowo reprezentację danych znacznie szybciej, niż mogą oni zrozumieć rzędy liczb w tekście. Projektanci narzędzi wizualizacji komputerowej wykorzystują szerokopasmowy kanał ludzkiej percepcji wizualnej. Systemy oprogramowania mogą dostarczać zarówno statyczne lub interaktywne reprezentacje wizualne danych, zależnie od potrzeb użytkownika i od tego, czy celem jest wyjaśnienie lub eksploracja danych.

Wizualna reprezentacja informacji ma swoją bogatą tradycję (np. rysunki, szkice itp.). Obecnie grafika komputerowa ma zdolność sterowania zbiorami danych znacznie większymi niż te, które mogłyby zostać przedstawione w postaci odręcznego obrazu. Dodatkowo grafika komputerowa oferuje nowe możliwości w animacji i interakcji wizualizacji. Wizualizacja jest użyteczna w wykrywaniu wzorców, szacowaniu położenia i szeregowaniu zadań. Wyniki obliczeń są zrozumiałe wtedy, gdy użytkownik ma do dyspozycji na wyjściu specjalny interfejs. Wizualizacja daje ten interfejs i w ten sposób staje się kluczem do interpretacji danych i wyników.

Inżynierowie, lekarze i naukowcy potrzebują wsparcia w podejmowaniu złożonych decyzji i analiz, w szczególności sposób dla zadań wymagających wielu danych. Często muszą się godzić z sytuacją nadmiaru danych i wówczas wizualizacja wielu przypadków pomaga w filtracji niepożądanych danych. Można używać wizualnej analizy systemów, aby zbadać scenariusze typu „co by było gdyby?” i aby badać dane z różnych perspektyw i założeń. Można identyfikować połączenia między wieloma atrybutami oraz szacować pewność każdej z konkluzji.

W aplikacjach dla symulacji komputerowych wizualizacja danych zależnych od czasu będzie kluczowa. Obecnie większość interaktywnych technik wizualizacji

używa jedynie danych statycznych. Przeważające obecnie metody wizualizacji danych zależnych od czasu najpierw określają kąt widzenia, a następnie, przechodząc przez kolejne kroki czasowe off-line, odtwarzają wizualizację jako obraz filmowy. To podejście jest często właściwe dla celów prezentacji, ale niezdolność do prowadzenia interaktywnej eksploracji podważa efektywność i stosowność wizualizacji dla celów badawczych. Stąd istnieje potrzeba nowych metod interaktywnej wizualizacji danych dużej skali i zależnych od czasu. Dodatkowo istnieje potrzeba metod wizualizacji pól wektorowych i tensorowych, zbiorów danych zebranych eksperymentalnie z wielu źródeł i zdolność do wizualizacji danych zarówno z perspektywy lokalnej, jak i globalnej.

Ze względu na złożoność i wielość danych pochodzących z symulacji, badacze zmuszeni do stosowania technik półautomatycznych drążenia danych z wielu multidyscyplinarnych obszarów nauki. Będzie to konieczne, aby wyodrębnić użyteczne informacje z danych. Aby osiągnąć ten cel, techniki drążenia danych muszą wykorzystywać techniki z zakresu obróbki i analizy obrazu i filmu, statystyki, rozpoznawania obrazów, optymalizacji matematycznej i innych. Naukowe techniki drążenia danych mogą być również używane do ilościowego porównywania różnych symulacji lub symulacji i eksperymentów, aby wyodrębnić podsumowujące statystyki z symulacji o wysokiej jakości, które można wykorzystać do budowy modeli i analizy danych eksperymentalnych.

Podczas gdy techniki drążenia danych mogą być efektywne w wyodrębnianiu informacji z danych uzyskanych podczas symulacji, wiele wyzwań pozostaje nadal otwartych.

Podsumowując ten punkt rozważań, należy stwierdzić, że:

- skończyła się era, w której obliczenia z wykorzystaniem dużej ilości danych oraz obliczenia naukowe dużej skali stanowiły odrębne obszary,
- wizualizacja jest pojęciem fundamentalnym dla naszej zdolności interpretowania modeli złożonych zjawisk
- istnieje potrzeba tworzenia podstaw dla wizualizacji w badaniach opartych na symulacji komputerowej z uwzględnieniem niepewności i możliwości badania nowych reprezentacji wizualnych błędów symulacji,
- wizualizacja i zarządzanie danymi to kluczowe technologie dla umożliwienia rozwoju zaawansowanych symulacji komputerowych. Dodatkowo niosą one wielką nadzieję dla odkryć naukowych, bezpieczeństwa, konkurencyjności ekonomicznej i innych obszarów w gospodarce narodowej. Wizualizacja komputerowa stanowi nierozdzielny element zdolności człowieka do interpretacji i użytkowania dużych zbiorów danych pochodzących z zastosowań badań opartych na symulacjach komputerowych.

4.6. Algorytmy obliczeniowe nowej generacji

Algorytmy tworzą most między modelami opisującymi systemy biologiczne, fizyczne i techniczne a urządzeniami obliczeniowymi, które generują cyfrową reprezentację symulacji komputerowej. Często szybkość urządzeń obliczeniowych jest przytaczana jako obraz zalet wykonywanej symulacji, a wpływ złożoności obliczeniowej algorytmów na redukcję złożoności czasowej (liczby operacji) i złożoności przestrzennej (rozmiar pamięci) nie jest szacowany. Przez ostatnie dekady postęp w możliwościach mikroprocesorów był opisywany prawem Moore'a, zgodnie z którym liczba mikroprocesorów na jednostkę powierzchni w procesorze podwaja się w każdych 18. miesiącach. Szybszy i bardziej efektywny sprzęt to silny bodziec dla badań opartych na symulacjach komputerowych. Jednak poprawa algorytmów jest dużo bardziej istotna.

Możliwości obliczeniowe indywidualnych mikroprocesorów będą w zasadzie tylko jednym z wielu ważnych czynników. Nowe miary będą potrzebne, aby opisać efektywność systemów obliczeniowych. Najbardziej podstawowe metryki to: czas rozwiązania w środowisku wieloprocesorowym, czas pracy od inicjacji procesu symulacji do przewidywanych rezultatów oraz miara poziomu ufności przewidywanych rezultatów. Jeśli czas otrzymania rozwiązania jest krótki, ale jakość i dokładność rozwiązania jest niska, to predykcja ma małą wartość.

Poprawa algorytmów musi skutkować znaczącym poprawieniem możliwości obliczeniowych, mierzonych jako czas do otrzymania rozwiązania. Ostatnie badania pokazują znaczący postęp w tym obszarze.

Do największych wyzwań dla nowych algorytmów należą zagadnienia optymalizacji i identyfikacji. Podejmowanie racjonalnych decyzji możliwe jest w wyniku optymalizacji złożonych problemów, opisywanych symulacjami komputerowymi w wielkiej skali. Takie problemy optymalizacji pojawiają się np. w projektowaniu inżynierskim (gdzie zmienne decyzyjne reprezentują konfigurację i budowę systemu) oraz w wytwarzaniu i zarządzaniu (gdzie zmienne decyzyjne reprezentują parametry sterujące). Zagadnienia identyfikacji są nieodłącznie związane z modelowaniem, gdy część parametrów geometrycznych lub materiałowych jest nieznaną i należy je wyznaczyć na podstawie pomiarów oraz odpowiedzi modelu symulowanego komputerowo. Zagadnienie to sprowadza się do minimalizacji miary błędu pomiędzy wielkościami zmierzonymi i symulowanymi komputerowo.

Niestety optymalizacja oparta na symulacjach komputerowych – zarówno w formie projektowania optymalnego, sterowania optymalnego, jak i zagadnień identyfikacji – jest dużo bardziej wymagająca obliczeniowo niż odpowiadające jej zagadnienie bezpośrednio. Wynika to z takiego faktu, że zagadnienia odwrotne są zwykle źle postawione, nawet gdy symulowane komputerowo zagadnienie bezpośrednio jest dobrze sformułowane. Jednym z głównych problemów jest umiejęt-

ność znalezienia optimum globalnego. Zagadnienie to komplikuje się jeszcze bardziej, gdy mamy do czynienia z optymalizacją wielokryterialną. Ponadto symulacja komputerowa zagadnienia bezpośredniego jest zaledwie „podproblemem” skojarzonym z optymalizacją, która może być o wiele rzędów wielkości bardziej złożona obliczeniowo. Gdy problem symulacji rozwiązania zagadnienia bezpośredniego wymaga zasobów rzędu „teraskali”, to problem optymalizacji będzie rzędu „petaskali”.

Dotychczasowe metody optymalizacji są mało skuteczne dla tego rodzaju zadań. Istnieje potrzeba stworzenia całkowicie nowej klasy efektywnych i odpornych algorytmów optymalizacji, które są przystosowane do złożonych problemów symulacji wieloskalowych i wielopoloowych. Nadzieją są algorytmy mające inspiracje biologiczną w postaci rozproszonych i równoległych algorytmów ewolucyjnych, sztucznych systemów immunologicznych lub algorytmów rojowych działających w środowisku gridowym.

Podsumowując ten aspekt, należy stwierdzić, że finansowanie badań naukowych w zakresie dyscyplin podstawowych powinno być zbalansowane z inwestycjami w zakresie rozwoju algorytmów i procedur obliczeniowych, w szczególności dla zagadnień optymalizacyjnych w zakresie modeli wieloskalowych i wielopoloowych.

5. Edukacja w zakresie modelowania i symulacji komputerowych

Jeśli mówi się obecnie o kryzysie eksplozji wiedzy, to odnosi się to także do wyraźnej ekspansji wiedzy wymaganej w osiągnięciu postępu związanego z nowoczesną symulacją komputerową. Ten rodzaj ekspansji ignoruje tradycyjne granice między dyscyplinami naukowymi, które są od dawna zasufladkowane w sztywnych strukturach organizacyjnych współczesnych wyższych uczelni, instytutów PAN oraz instytutów badawczych. W pewnym sensie struktura instytucji edukacyjnych staje się przestarzałym ciężarem. To oczywiście zniechęca do innowacji, ogranicza krytycznie ważną wymianę wiedzy między dyscyplinami i zniechęca do podejmowania badań oraz studiów interdyscyplinarnych.

Nie ulega wątpliwości, że wyższe uczelnie akademickie, instytuty PAN oraz instytuty badawcze powinny znacząco zmienić swoje struktury organizacyjne, aby promować i prowadzić badania naukowe oparte na współpracy interdyscyplinarnej i wielodyscyplinarnej. Uczelnie wyższe oraz instytuty PAN powinny tworzyć nowe programy i kierunki studiów, także na poziomie doktoranckim, o interdyscyplinarnym charakterze. Ma to także priorytetowe znaczenie w kształceniu w Polsce w obszarze nauk obliczeniowych.

Jeśli symulacja komputerowa staje się dyscypliną naukową, narzędziem inżynierskim i długookresową możliwością edukacyjną, to system nauczania nauk technicznych na poziomie wyższym w Polsce powinien zostać zrestrukturyzowany. Obecny system nie zapewnia szerokiego zakresu interdyscyplinarnej wiedzy, wymaganej przez inżynierów i naukowców jutra. Aby odnieść sukces, muszą oni nabyć istotną i głęboką wiedzę z zakresu matematyki obliczeniowej i stosowanej, technologii informacyjnych oraz wybranych dyscyplin inżynierskich i naukowych. Absolwenci takich kierunków powinni ponadto mieć dostęp do dalszego kształcenia w zakresie zagadnień molekularnych i kwantowych, mechaniki statystycznej i środków ciągłych, nauk biologicznych, fizyki i chemii, analizy obrazów, geometrii i wizualizacji. Udział w multidyscyplinarnych zespołach badawczych i stażach przemysłowych będzie dawał studentom szeroką perspektywę naukową techniczną, tak samo jak umiejętności komunikowania się, które są niezbędne dla efektywnego rozwoju i rozwinięcia badań opartych na symulacji komputerowej.

Integracja badań opartych na modelowaniu i symulacjach komputerowych z systemem edukacyjnym będzie poszerzała programy studiów II stopnia. Studenci będą mieli dostęp do materiałów edukacyjnych, które demonstrują teorię i praktykę, a także uzupełniają tradycyjne podejście eksperymentalne i teoretyczne w pozyskiwaniu wiedzy. Dodatkowo wprowadzenie nowych zespołów i pól badawczych dla badań związanych z pracami dyplomowymi sprawi, że studenci nauk technicznych i nauk ścisłych będą mogli pracować razem w interdyscyplinarnych zespołach.

Innym kluczowym zagadnieniem jest kształcenie doktorantów w zakresie modelowania i symulacji komputerowych. Sztywna struktura dyscyplin naukowych obowiązująca w Polsce znacznie utrudnia promowanie młodej kadry naukowej z tego obszaru. Warto rozważyć i przedyskutować możliwość promowania młodej kadry doktorów z tego zakresu w ramach dyscypliny informatyka lub utworzenie nowej dyscypliny naukowej o wyraźnym charakterze obliczeniowym, np. inżynierii (technologii) obliczeniowej [computational engineering (technology)].

Podjęcie działań w tym zakresie wymaga istotnego wsparcia liderów środowiska naukowego oraz przemysłu.

Podsumowując, należy stwierdzić, że znaczące postępy w modelowaniu i symulacji komputerowej wymagają dramatycznych zmian w edukacji na wszystkich poziomach kształcenia z zakresu nauk ścisłych i technicznych. Edukacja interdyscyplinarna w naukach obliczeniowych i technologiach obliczeniowych powinna uzyskać wyraźny priorytet. Powinny być wprowadzone interdyscyplinarne programy nauczania w zakresie nauk obliczeniowych, a tradycyjne granice między dyscyplinami w szkolnictwie wyższym powinny zostać otwarte dla wymiany informacji między specjalistami z różnych dziedzin, pracującymi wewnątrz interdyscyplinarnych zespołów naukowych.

6. Wnioski

Kluczowym elementem współczesnej metodologii badań naukowych jest obszar skupiony na modelowaniu i symulacji komputerowej złożonych systemów biologicznych i technicznych oraz zjawisk fizycznych i chemicznych, a także na akwizycji i analizie danych, które wymagają określonych standardów dotyczących precyzji i niezawodności. Jest to obszar o różnorodnych i interdyscyplinarnych kierunkach badawczych, związany ściśle z narodowym rozwojem technologicznym Polski. Przez ostatnie dekadę rozwój w modelowaniu matematycznym, algorytmach obliczeniowych i technologiach informacyjnych dużej skali prowadził do znaczących postępów w ochronie zdrowia, bezpieczeństwie, wydajności i jakości życia. W tej chwili, będąc członkiem Unii Europejskiej, jesteśmy jako państwo w historycznym momencie, w którym decyduje się rola i pozycja Polski na wiele lat. Nie jest możliwe odgrywanie ważnej i liczącej roli w UE bez wzmożonego inwestowania w ten obszar badań, ponieważ modelowanie i symulacja jest kluczowym elementem przyspieszenia postępu w technice.

Nasz kraj stoi przed szansą szybkiego rozwoju, na progu olbrzymiego skoku cywilizacyjnego i technologicznego, pod warunkiem, że skorzysta z szansy, jaką daje postawienie na rozwój oparty na wiedzy.

Ten rozwój ma bardzo ważne konsekwencje strategiczne:

- modelowanie i symulacja komputerowa pozwalają na badanie zjawisk naturalnych i systemów technicznych, stanowiących wyzwanie dla analizy, pomiarów i metodologii eksperymentalnej. W efekcie założenia empiryczne zostaną zastąpione modelami obliczeniowymi o podstawach naukowych,
- modelowanie i symulacje mają zastosowanie w różnych obszarach, które decydują o poziomie cywilizacyjnym – od mikroprocesorów, poprzez infrastrukturę miast, do ochrony zdrowia; ma to również swoje konsekwencje dla bezpieczeństwa narodowego. Ponadto nowe metody symulacji będą stanowiły podstawę dla rozwoju technologii, które są obecnie rozważane jedynie potencjalnie,
- modelowanie i symulacje pozwalają na projektowanie i wytwarzanie materiałów i konstrukcji na naukowej podstawie, z mniejszym udziałem metody prób i błędów i krótszymi cyklami projektowania,
- modelowanie i symulacje mogą poprawić zdolność do przewidywania rezultatów i optymalizacji rozwiązań przed gromadzeniem rzeczywistych danych do procesu projektowania i podejmowania decyzji,
- modelowanie i symulacje rozwijają zdolność do radzenia sobie z problemami, które są zbyt złożone dla tradycyjnych metod; przykładowo, można do nich zaliczyć problemy modelowania w wielu skalach czasowych i przestrzennych, problemy modelowania wielopolowego oraz z nieznanym poziomem niepewności,

- modelowanie i symulacje wprowadzają narzędzia i metody, które mogą mieć zastosowanie w inżynierii biomedycznej i we wszystkich dyscyplinach inżynierskich – w inżynierii elektrycznej, komputerowej, mechanicznej, lądowej, chemicznej, nuklearnej i materiałowej.

Jest bardzo ciekawe, że niezależne badania dotyczące przyszłości technologii są jednomyślne w swych wnioskach mówiących, iż modelowanie i symulacje komputerowe są kluczowym elementem osiągania postępu w nauce i technice. Wyzwania, które determinują postęp, są tak samo istotne jak korzyści. Na przykład, trzeba sformułować metody łączenia zjawisk w systemy o dużej rozpiętości czasowej i przestrzennej. Będzie trzeba stworzyć metody zdolne do opisywania zjawisk makroskopowych za pomocą zachowań odnoszących się do skal niższych. Istnieje potrzeba lepszych procedur optymalizacji dla symulowanych systemów złożonych. Procedury te powinny być zdolne do uwzględnienia niepewności. Należy tworzyć podstawy pod metody weryfikacji, walidacji i zarządzania wiedzą niepewną. Dodatkowo istnieje potrzeba szybkiej generacji wysokiej jakości modeli o złożonej geometrii i własnościach materiałowych.

Polskie środowiska naukowe nie są osamotnione w uświadomieniu sobie pilności potrzeb w zakresie znalezienia rozwiązań przedstawionych problemów. Wiele państw Europy, Azji, a przede wszystkim USA współzawodniczy w wyścigu poprzez zwiększanie nakładów finansowych na inwestycje dotyczące tego obszaru nauki i w kompletowaniu zasobów intelektualnych, które pozwolą uzyskać rozwiązanie problemów technicznych opisanych w niniejszym wykładzie. Wydaje się, że cywilizacyjna pozycja Polski będzie zagrożona, jeśli nie zostaną szybko podjęte odpowiednie działania.

Aby dotrzymać kroku opisanym trendom wzrostu w tym krytycznie strategicznym obszarze technologii, należy:

- zastanowić się nad zmianami organizacyjnymi finansowania badań naukowych, aby ułatwić działania w szerokim obszarze badań opartych na modelowaniu i symulacji komputerowej,
- zwiększyć wyraźnie fundusze na badania z tego zakresu,
- opracować długookresowe programy badań naukowych wysokiego ryzyka, aby osiągnąć korzyści płynące z rozwoju tych badań,
- zainicjować zmiany w systemie kształcenia na poziomie II (studia magisterskie) oraz na poziomie III (studia doktoranckie), aby zwrócić uwagę na wielodyscyplinarną naturę współczesnej inżynierii oraz pomóc studentom i doktorantom osiągać konieczne umiejętności w zakresie modelowania i symulacji komputerowych.

Należy zauważyć, że poprawa szybkości działania i wydajności komputerów jest ważną składową postępu, ale nie powinno to zastąpić wysiłków w innych dys-

cyplinach leżących u podstaw modelowania i symulacji komputerowych. Należy skupić się na takich inicjatywach, które promują interakcje między wieloma dyscyplinami i dopasowują się naturalnie i strategicznie w ramach tego, co tworzy „cyberinfrastrukturę”.

Bibliografia

- [Raport 2006] Simulation-Based Engineering Science, NSF Report, 2006.
- [Raport 2009] International Assessment of Research and Development in Simulation-Based Engineering and Science, WTEC Panel Report, Baltimore 2009.
- [Burczyński 2010] T. Burczyński, Simulation-Based Science and Engineering, ECCOMAS Report, 2010.
- [Kleiber 1999] M. Kleiber, Modelowanie i symulacja komputerowa – moda czy naturalny trend rozwojowy nauki, Nauka, nr 4, 1999, 29–41.
- [Popper 2002] K.R. Popper, Logika odkrycia naukowego. PWN, 2002.