

09.09.2009 - Независимая газета

Число, возведенное в абсолют

 **Юрий Магаршак**

Об авторе: Юрий Магаршак - профессор, исполнительный вице-президент Международного комитета интеллектуального сотрудничества.

Году, если не ошибаюсь, в 1990-м при встрече на некоей научной конференции в США я передал незадолго до того опубликованную статью с использованием диаграммных методов для анализа систем электронного транспорта в полипептидах руководителю отдела теоретической биологии одного из ведущих американских университетов. Взглянув на абстракт, лидер теоретической биологии Америки тревожно спросил:– А там есть формулы?

– Ну, есть. А что?– Тогда берите статью назад.

– Почему?– Потому что я не доверяю формулам.

– Вы? Не доверяете формулам? – переспросил я руководителя (повторяю) отдела теоретической биологии одного из университетов Лиги Плюща.

– Не доверяю.– Любым формулам? Независимо от того, правильные они или нет?!

– Не доверяю. Любым формулам не доверяю.

– А чему же вы доверяете?– Числу.

Тогда этот разговор показался мне признаком безумия крупного ученого и организатора науки. Однако теперь, оглядываясь из двадцатилетнего удаления, я понимаю, что это было симптомом отнюдь не индивидуальной болезни. А коллективной, распространившейся по научному миру. Болезни настолько серьезной и так фундаментально влияющей не только на все области науки и технологий, но и на цивилизацию в целом, что пришло время сделать анамнез недуга. Ибо, по моему глубокому убеждению, противостояние компьютерного моделирования и теории, основанной на математических методах, – Болезнь Века.

Новый вычислительный мир

Эпоху, приблизительно начиная от Максвелла до поколения Гелл-Манна и учеников Ландау, можно считать эрой торжества теории в познании. Теории, основанной, само собой разумеется, на математике. Глубокое знание и повседневное использование математических методов для теоретика было так же необходимо, как для тореадора владение плащом и мулетой.

Теоретик, работающий в любой научной области, знает, что далеко не все задачи можно решить аналитически: для подавляющего большинства проблем получить точные и даже приближенные решения не удастся. Поэтому появление аппарата (не математического – вычислительного!), позволяющего ввиду колоссальной скорости вычислений получать решения, о которых теоретики не могли даже мечтать, открыло не просто новые горизонты – новый мир! Появившаяся затем возможность визуализации полученных результатов преобразила научное знание еще более.

Однако процесс моделирования на компьютере на этом не остановился. Он пошел дальше, распространяясь на все новые и новые области. При этом нетривиальная математика перестала быть основой большинства компьютерных программ. Все чаще в них закладываются параметры или наборы параметров, которые приближают поведение модельной системы к требуемому. Подобный подход сам по себе прагматичен и имеет право на существование. Беда в другом: мало-помалу подбор параметров в модели стал самоцелью, вытеснив на второй план поиск адекватной теории.

Специалисты по моделированию и теоретики – разные человеческие типы. Подавляющее большинство программистов попросту не имеет понятия о математике, которая должна стоять за моделями, ими строящимися. Глубокое изучение математики вообще перестало быть необходимым для программистов. Математические теории отошли на второй план по сравнению с вариациями параметров, дизайном и графикой. Что в приложениях к научным задачам – настоящая беда.

Приведу пример из близкой мне области. При моделировании функционирования ферментов в модель вставляются наборы коэффициентов и потенциалов, подобранных таким образом, чтобы результат был близок наблюдаемому в экспериментах. Подбор коэффициентов в моделях и игра с ними (не только в молекулярной биологии – в любой области знаний и индустрии) стала самостоятельной областью, финансируемой намного лучше, чем теория как таковая.

Но давайте задумаемся, посмотрев на себя в зеркало, или на летящую бабочку, или на цветок розы: неужто какой-либо разумный человек может поверить, что вся жизнь основана не на фундаментальных законах, а на подборе в каждом случае каких-то коэффициентов и потенциалов с дробными степенями (число которых может измеряться десятками)? Разумеется, за функционированием живого должны стоять фундаментальные принципы. На словах приблизительно такие слова при моделировании фундаментальных процессов и произносятся. Однако на практике к поиску фундаментальных основ обращаются все реже и реже.

Моделирование и теория с каждым годом становятся все более оторваны друг от друга. Профессор, который 20 лет назад не хотел читать статью, в которой есть формулы, оказался не рутинером, а буреветником. К вящему сожалению.

Theory-and-Modeling

Тем не менее, я смею утверждать, что теория и моделирование комплементарны друг другу. Это означает, в частности, следующее:

1. Моделирование дает возможность проверки множества режимов системы и осуществить весьма совершенную визуализацию. Однако компьютерное моделирование – по крайней мере, в современной форме – не дает возможности получения общих закономерностей, таких как вывод уравнения Шредингера или Максвелла.
2. Теория позволяет получить аналитические результаты, обладающие общностью. Однако для анализа множества приложений – будь то аэродинамика или ферментативный катализ – необходимо моделирование с конкретными числами и вариациями режимов системы.

Комбинирование возможностей теории и моделирования – особая профессия, требующая сочетания навыков и талантов, необходимых теоретикам прошлого века и специалистам по компьютерному моделированию современности. Специалист Т&М будет отличаться и от теоретика, и от программиста так же, как десятиборец в легкой атлетике отличается от бегуна, метателя и прыгуна.

Примером Т&М-проекта, блестяще воплощенного в бизнес, является компания Google (один из основателей которой, причем именно тот, который развил непосредственно технологию, имеет русские корни). Без математического анализа «разряженных» матриц, то есть таких, в которых подавляющее большинство элементов равно нулю, создание эффективного интернет-поисковика было бы невозможно.

И подобных задач, в которых на основе нетривиального сочетания теории и моделирования создается новая перспективная технология, превеликое множество.

С помощью моделирования на основе уже известных законов можно делать конкретные предсказания там, где это необходимо. Например, предсказать погоду на завтра или вычислить оптимальную траекторию спуска спутника с приземлением в заданной точке. Но с помощью моделирования невозможно вывести ни одного нового закона.

Существующая и все возрастающая фрагментарность знаний, в том числе естественно-научных, в значительной мере обусловлена доминированием моделирования над теорией. «Глядя из компьютерного моделирования», природа воспринимается как совокупность частных. Между тем фундаментальных неясностей, например, в быстро прогрессирующей биологии, на стыках между естественными науками и в наномасштабах (промежуточных между размерами атомов и сплошной средой) множество, и их число возрастает.

В мире, в котором know how преумножается, с той же скоростью должна, казалось бы, возникать потребность и в know why? Нарушение баланса между теорией и моделированием, между «как» и «почему» – одна из причин кризиса современной цивилизации. И этот баланс должен быть восстановлен.

Познание в русском стиле

Русский стиль познания и созидания имеет узнаваемый почерк и колоссальную перспективу. «Дай русскому гимназисту карту звездного неба, он назавтра принесет ее исправленной», – грустно пошутил Достоевский. В применении к моделированию и построению теорий, однако, дерзновенность – прекрасное качество! Ошибки, которые неизбежно могут возникнуть, будут исправлены по дороге – счастливое свойство компьютеров, в которых что написано пером вырубается не топором, а легким касанием клавиш клавиатуры.

Помимо подготовки специалистов Т&М широкого профиля, целесообразно выделить основные направления в новой специальности. Прежде всего, это относится к нанотехнологиям, на которые в России выделены колоссальные суммы. При этом, какой именно должна быть комбинация теоретических подходов и моделирования, должно стать предметом не только профессионального, но и государственного размышления – подобно тому, как это, без сомнения, происходило при принятии решений о создании шарашек, теоретических отделов в НИИ и теоркафедр в вузах.

Дерзновенность русского духа, склонность к решению общих проблем и существование традиций построения теорий дает шанс сделать русскую школу Theory-and-Modeling одной из ведущих в мире в кратчайшие сроки.

Стратегическая необходимость программы Theory&Modeling, аналогичной той, которая в 50-е и 60-е годы прошлого века позволила советской науке в кратчайшие сроки выйти на лидирующие в мире позиции, несомненна. Особенно актуальна она во время кризиса, так как (А) экономит капиталовложения по сравнению с другими отраслями технологий, (Б) не требует дорогостоящего оборудования, (С) имеет колоссальную технологическую и финансовую перспективу, (Д) опирается на советскую математическую и теорфизическую традицию, равно как и на (Е) склонность Русского Духа обращаться к фундаментальным междисциплинарным проблемам.

* * *

Перечитывая уже написанную статью, я обратил внимание на то, что название предлагаемой специальности (и одноименного с ней направления в науке и технологиях) – Т&М, по-английски звучит как T-and-Em, то есть tandem, по-русски – тандем («ТандЭм»). Это полностью отвечает букве и духу объединения двух профессий: теоретика и специалиста по моделированию. Поразительное и, я бы сказал, судьбоносное совпадение!

Нью-Йорк