Лекция № 4
Имитационное моделирование
Примеры математических моделей

Цель лекции

- Изучить понятие имитационного моделирования. Определить его цель, виды и области применения.
- Подробно рассмотреть метод статистического моделирования и метод Монте-Карло.
- Рассмотреть примеры построения математических моделей в различных областях: физике, химии и биологии.

Содержание лекции

- Имитационное моделирование. Цель, виды и области применения имитационного моделирования.
- Статистическое моделирование. Метод Монте-Карло.
- Примеры построения математических моделей в различных областях.
  - Модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы, твердого и деформируемого тела.
  - Математические модели в химии, построение кинетических моделей химических процессов.
  - Модели эволюции и развития в биологии, модели распределения биологических систем.

ЧТО ТАКОЕ ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ?

Имитация

Имитация – это процесс «выполнения» модели, проводящий ее через (дискретные или непрерывные) изменения состояния во времени. Имитация, как метод решения нетривиальных задач, получила начальное развитие в связи с созданием ЭВМ в 1950-х – 1960х годах.

Существует класс объектов, для которых по различным причинам не разработаны аналитические модели, либо не разработаны методы решения полученной модели. В этом случае математическая модель заменяется имитатором или имитационной моделью.

Имитационная модель – логико-математическое описание объекта, которое может быть использовано для экспериментирования на компьютере в целях проектирования, анализа и оценки функционирования объекта.

Имитационную модель можно рассматривать как множество правил (дифференциальных уравнений, карт состояний, автоматов, сетей и т.п.), которые определяют, в какое состояние система перейдет в будущем из заданного текущего состояния.

Имитационное моделирование

Имитационное моделирование – это:

- Метод, позволяющий строить модели, описывающие процессы так, как они проходили бы в действительности.
- Метод исследования, при котором изучаемая система заменяется моделью с достаточной точностью описывающей реальную систему и с ней проводятся эксперименты с целью получения информации об этой системе.

Цель имитационного моделирования состоит в воспроизведении поведения исследуемой системы на основе результатов анализа наиболее существенных взаимосвязей между ее элементами или другими словами – разработке симулятора исследуемой предметной области для проведения различных экспериментов.

Использование имитационного моделирования

- Дорого или невозможно экспериментировать на реальном объекте.
- Возникновение трудностей при построении математической модели сложной системы:
  - большое число параметров;
  - много связей между элементами и разнообразные нелинейные ограничения;
  - реальные системы зачастую подвержены влиянию случайных различных факторов.

Т.е. невозможно построить аналитическую модель.

- Необходимо имитировать поведение системы во времени.

Преимущества имитационного моделирования

- Возможность решения более сложных задач.
- Просто учитывать такие факторы, как:
  - наличие дискретных и непрерывных элементов;
  - нелинейные характеристики элементов системы;
  - многочисленные случайные воздействия;
  - и другие.

В настоящее время имитационное моделирование – наиболее эффективный метод исследования систем, а часто и единственный практически доступный метод получения информации о поведении системы.

Применение имитационного моделирования

- Для оценки вариантов структуры системы.
- Для оценки вариантов эффективности различных алгоритмов управления системой.
- Для оценки влияния изменения различных параметров системы.
- Может быть положено в основу структурного, алгоритмического и параметрического синтеза систем, когда требуется создать систему с заданными характеристиками при определенных ограничениях.

Области применения имитационного моделирования

- Физические процессы.
- Материаловедение.
- Нанотехнологии.
- Бизнес процессы.
- Производство.
- Информационная безопасность и др.

Методы имитационного моделирования

- **Метод статистических испытаний (Монте-Карло)** – общее название группы численных методов, основанных на получении большого числа реализаций стохастического (случайного) процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи .
- **Метод статистического моделирования -** численный метод решения математических задач, при котором искомые величины представляют вероятностными характеристиками какого-либо случайного явления, это явление моделируется, после чего нужные характеристики приближенно определяют путем статистической обработки «наблюдений» модели.

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Метод Монте-Карло

Название метода происходит от города Монте-Карло в княжестве Монако, знаменитого своим игорным домом.

Одним из механических приборов для получения случайных величин является рулетка.

История метода Монте-Карло

- **1878 год.** Возникновение идеи использования случайных явлений в области приближенных вычислений (работа Холла об определении числа π с помощью случайных бросаний иглы на разграфленную параллельными линиями бумагу).
- **1949 год.** Рождение метода (статья Метрополиса и Улама «Метод Монте-Карло» в американском журнале ассоциации статистиков). Создателями метода считают Дж. Неймана и С. Улама.
- **в 1955-1956 годах** появились первые отечественные работы по методу Монте-Карло.

Принципы получения случайных величин

- **Рулетка.** Простейшая схема – вращающийся диск с цифрами, резко останавливающийся для определения цифры, на которую указывает неподвижная стрелка. Пуская и останавливая рулетку можно составить таблицу случайных цифр. Самая большая такая таблица - 1 000 000 цифр. Такие таблицы используются для ручного счета. Недостаток для ЭВМ – большой объем памяти.
- **Подключение рулетки к ЭВМ.** Недостаток – низкое быстродействие.
- **Для генераторов случайных величин использовать шумы в электронных лампах.** Если за некоторый фиксированный промежуток времени уровень шума превысил заданный порог четное число раз, то в разряд некоторого числа записывается единица, если нечетное – ноль. Недостатки этого метода генерации:
  - Возможны неисправности электронных генераторов шума (неравновероятность нулей и единиц).
  - Невозможно повторение случайной последовательности чисел, полученной в одном эксперименте.

Псевдослучайные числа

Числа, получаемые по какой-либо формуле и имитирующие значения случайной величины, называются **псевдослучайными**.

Первый метод получения псевдослучайных чисел (1951 г. Дж. фон Нейман) – **метод середины квадратов**: Есть произвольное 4-значное целое число $n1= 9876$. Возведем его в квадрат, выберем 4 средние цифры и обозначим $n2=5353$. Продолжая указанные рекуррентные действия будем иметь $n3$, $n4$ и т.д. В качестве псевдослучайных значений предлагалось использовать следующие числа 0,9876; 0,5353 и т.д.

Схема получения псевдослучайных чисел - очередное значение получается из предыдущего или предыдущих.

Достоинства методов получения псевдослучайных чисел:

- Малая скорость генерирования случайных чисел, а значит высокое быстродействие.
- Компактность программ получения псевдослучайных чисел в силу простоты рекуррентных соотношений.
- Воспроизводимость последовательности случайных чисел.

Сущность метода Монте-Карло

Требуется найти значение «a» некоторой изучаемой величины. Для этого выбирают такую случайную величину X, математическое ожидание которой равно: $M(X)=a$.

Решение: производят n испытаний, в результате которых получают n возможных значений X; вычисляют их среднее арифметическое и принимают x в качестве оценки (приближенного значения) a^* искомого числа a.

Преимущества и недостатки метода

- **Преимущества:**
- не требует никаких предложений о регулярности;
- приводит к выполнимой процедуре в многомерном случае, когда численное интегрирование неприменимо (n>10);
- легко применять при малых ограничениях или без предварительного анализа задачи;
- простая структура вычислительного алгоритма.
- **Недостатки:**
- Границы ошибки не определены точно, но включают некую случайность.
- Статическая погрешность убывает медленно.
- Необходимо иметь случайные числа.

Применение метода Монте-Карло

- Первоначально метод использовался **для решения задач нейтронной физики**, где традиционные численные методы оказались мало пригодными.
- Далее его влияние распространилось на **широкий класс задач статистической физики.**
- Применяется в **задачах, допускающих теоретико-вероятностное описание.**
- Оказал существенное влияние на **развитие методов вычислительной математики** (например, развитие методов численного интегрирования).
- **Для моделирования физических процессов.**

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сущность метода

В данном методе искомую величину представляют математическим ожиданием числовой функции от случайного исхода явления: т.е. интегралом по вероятностной мере.

Проведение каждого «эксперимента» распадается на две части:

- «розыгрыш» случайного исхода;
- вычисление функции.

Применяется для решения интегральных уравнений при исследовании больших систем.

Преимущества и недостатки метода

Преимущества:

- Универсальность.
- Не требует большого объема памяти.

Недостатки:

- Большие случайные погрешности.
- Статическая погрешность убывает медленно при увеличении числа экспериментов.

Математические модели в физике

Симон Лаплас

- Одна из первых линейных моделей – **закон Гука**

$$F = -kx$$

- **Уравнение Лапласа** – уравнение в частных производных в трехмерном пространстве

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0$$

- **Уравнения Максвелла** для электромагнитного поля

$$\nabla \cdot D = p, \quad \nabla \times E = -\frac{dB}{dt}, \quad \nabla \cdot B = 0, \quad \nabla \times H = j + \frac{dD}{dt}$$

Эрвин Шредингер

- Фундаментальное уравнение волновой и квантовой механики – **уравнение Шредингера**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi$$

Джеймс Клерк Максвелл

Математические модели в физике

- **Уравнения баланса (законы сохранения).**
  - Массы.
  - Импульса .
  - Энергии.
- **Уравнение диффузии.**
  - Уравнения движения жидкостей и газа.

Математические модели в химии

- Первая попытка по применению математики в химии – 1741 год М. В. Ломоносовым рукопись «Элементы математической химии»
- В XIX веке понятие «математическая химия» начал использовать Дюбуа-Реймон.
- Первая работа по применению теории графов в химии (Артур Кэли).
- В современной химии термин «математическая химия» был введен в 1970-х годах.

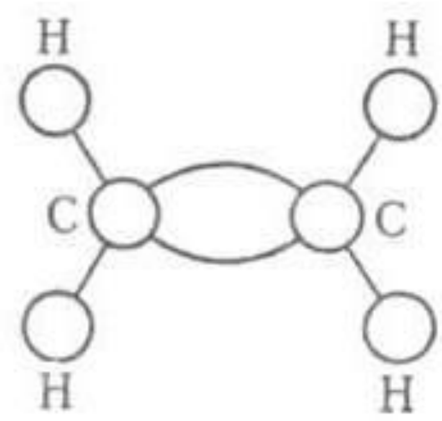
Математическая химия – раздел теоретической химии, посвященный новым применениям математики к химическим задачам. Основная область интересов – это математическое моделирование гипотетически возможных физико-химических и химических явлений и процессов, а так же их зависимость от свойств атомов и структуры молекул.

Способы, отражающие новизну в математической химии:

- развитие новой химической теории;
- развитие новых математических подходов, которые позволяют проникнуть в суть или решить проблемы химии.

Математические модели в химии

- Самая известная модель математической химии – молекулярный граф (теория Р. Бейдера).



К.М. Гульдберг (слева) и П. Вааге.

- **Закон действующих масс -** математик К. Гульдбергом и химик-экспериментатор П. Вааге.
- **Граф механизма химических превращений** и дифференциальные уравнения химической кинетики.

Якоб Хендрик Вант-Гофф

Методы математической химии

- Теория графов (химическая кинетика).
- Топология (стереохимия и исследования свойств поверхностей потенциальной энергии).
- Теория узлов.
- Комбинаторика.
- Теория групп (квантовая химия и стереохимии).
- Фрактальная геометрия.
- Теория нелинейных дифференциальных уравнений (химическая кинетика).
- Теория динамических систем.
- Теория катастроф и бифуркаций (описание структурных изменений в молекулах).
- Операторные алгебры (квантовая химия).
- Математическая логика.
- Теория информации и методы искусственного интеллекта (химическая информатика, хемоинформатике).
- Теория интегро-дифференциальных уравнений (гетерогенный катализ и адсорбция).

Математические модели в биологии

- **Динамика популяций.** Ряд Фибоначчи

  1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89,....,

Леонардо Пизанский

Томас Мальтус

- **Модель Мальтуса** (1778) – описывает размножение популяции со скоростью, пропорциональной ее численности.

Применение моделей в биологии

- Изучение биологических структур, функций и процессов на разных уровнях организации живого:
  - Молекулярном.
  - Субклеточном.
  - Клеточном.
  - Органно-системном.
  - Организменном.
  - Популяционно-биоценотическом.
- Моделирование различных биологических феноменов.
- Исследование условий жизнедеятельности отдельных особей, популяций и экосистем.

Виды моделей в биологии

- **Биологические.** В нашем курсе мы их не рассматриваем.
- **Физико-химические.**
  - С 60-х гг. 19 в. были сделаны попытки создания физико-химической модели структуры и некоторых функций клеток (немецкий ученый Траубе в 1867г. имитировал рост живой клетки, а французский физик С. Ледюк в 1907г. получил структуры, внешне напоминающие водоросли и грибы).
  - Сложные модели строились на принципах электротехники и электроники (построены электронные схемы, моделирующие биоэлектрические потенциалы в нервной клетке).
  - Модели биологических мембран позволили исследовать физико-химические основы процессов транспорта ионов и влияние на него различных факторов.
  - Моделирование колебательных процессов, характерных для многих биологических феноменов, - дифференцировки, морфогенеза, явлений в сложных нейронных сетях.
- **Математические (логико-математические).**
  - Модель сердечной деятельности (голл. ученые ван дер Полом и ван дер Марком) - основана на теории релаксационных колебаний. Указала на возможность особого нарушения сердечного ритма, впоследствии обнаруженного у человека.
  - Модель возбуждения нервного волокна (англ. ученые А. Ходжкином и А. Хаксли).
  - Логико-математические модели взаимодействия нейронов (амер. ученые У. Мак-Каллока и У. Питса). Модель основана на теории нервных сетей.
  - Модель биоценозов на основе системы дифференциальных и интегральных уравнений (В. Вольтерра, А. Н. Колмогоров).

Модель «хищник-жертва»

Математическая модель двухвидовой системы

- Численности популяций жертв и хищников зависят только от времени.
- В отсутствие взаимодействия численность видов изменяется по модели Мальтуса; при этом число жертв увеличивается, а число хищников падает, так как им в этом случае нечем питаться.
- Естественная смертность жертвы и естественная рождаемость хищника считаются несущественными.
- Эффект насыщения численности обеих популяций не учитывается.
- Скорость роста численности жертвы уменьшается пропорционально численности хищников, а темп роста хищников увеличивается пропорционально численности жертвы.

Модели эволюции

- **Синтетическая теория эволюции** (с начала 20в.). Исследования Drosophila – мутационные изменения могут быть очень небольшими. Математические модели были разработаны Р. Фишером, Дж. Холдейном и С. Райтом.

Механизмом прогрессивной эволюции является отбор организмов, которые получают выгодные мутации.

- **Молекулярная эволюция: теория нейтральности** (1950-1960-е годы, определена структура ДНК, расшифрован генетический код). Математические модели предложены М. Кимурой.

На молекулярном уровне мутации преимущественно нейтральны или слабо вредны.

- **Модель Д.С. Чернавского и Н.М. Чернавской.**
- **Модель блочно-иерархического эволюционного отбора.**
- **Блочно-модульный принцип организации и эволюции молекулярно-генетических систем управления (В.А. Ратнер).**
- **Модель «генов-мутаторов».**

Рональд Эйлмер Фишер

Мотоо Кимура

Контрольные вопросы

1. Что такое имитационное моделирование?
2. Какие можно выделить виды имитационного моделирования?
3. В каких областях применяется имитационное моделирование?
4. В чем заключается метод статистического моделирования?
5. Расскажите суть метода Монте–Карло.
6. В чем преимущества и недостатки метода Монте–Карло?
7. Что такое псевдослучайные числа?
8. Приведите несколько примеров математических моделей для описания физических процессов.
9. Какие математические методы применяются в химии?
10. Назовите простейшие математические модели в биологии.
11. Какие модели эволюции вы знаете?