



Уральский
федеральный
университет

С.В. Звонарев

Основы математического моделирования

Лекция № 3. Построение математической модели. Вычислительный эксперимент

Екатеринбург

2012

- Изучить этапы моделирования и способы построения математических моделей.
- Рассмотреть понятие вычислительный эксперимент. Определить его основные этапы.
- Описать преимущества и сферы применения вычислительного эксперимента.

- Этапы построения математической модели.
- Подходы к построению математических моделей.
- Блочный принцип построения математических моделей.
- Вычислительный эксперимент. Его основные этапы.
- Преимущества и сферы применения вычислительного эксперимента.

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Процесс построения математической модели

- Трудоемок.
- Длителен.
- Необходима работа специалистов достаточно высокого уровня с хорошей подготовкой:
 - в предметной области, связанной с объектом моделирования;
 - в области прикладной математики;
 - со знанием современных численных методов;
 - в области программирования;
 - имеющих представление о возможностях и особенностях современных вычислительных систем.

Этапы построение математической модели



1. Обследование объекта моделирования

Целью этапа является формирование содержательной постановки задачи моделирования – перечня сформулированных в словесной форме основных вопросов об объекте моделирования, интересующих заказчика.

Конструирование модели начинается со словесно-смыслового описания объекта или явления:

- Сведения общего характера о природе объекта.
- Цели его исследования.
- Некоторые предположения.

Данный этап можно также назвать формулировкой предмодели.

2. Концептуальная и математическая постановка задачи

Цель этапа:

- Формулировка в терминах конкретных дисциплин перечня основных вопросов, интересующих заказчика, а также совокупности гипотез относительно свойств и поведения объекта моделирования.
- Получение совокупности математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

На этом этапе происходит завершение идеализации объекта:

- Отбрасываются все факторы и эффекты, которые представляются не самыми существенными для его поведения.
- Выделяют основные явления и элементы в объекте и затем устанавливают связи между ними.
- Для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение, отражающее его функционирование.
- В математическое описание (система алгебраических, дифференциальных уравнений) включают уравнения связи между различными выделенными явлениями.

3. Качественный анализ и проверка корректности модели

Доказательство корректности математической задачи достаточно сложная проблема. Математическая модель является корректной, если для нее осуществлен и получен положительный результат всех контрольных проверок:

- контроль размерности;
- контроль порядков;
- контроль характера зависимостей;
- контроль экстремальных ситуаций;
- контроль граничных условий;
- контроль физического смысла;
- контроль математической замкнутости.

4. Выбор и обоснование выбора

методов решения задачи

Целью этапа является выбор наиболее эффективного (по скорости получения решения и его наибольшей точности) метода решения.

Все методы решения задач, составляющих «ядро» математических моделей, можно подразделить на:

- Контроль размерности.
- Аналитические.
- Алгоритмические.

5. Поиск решения или реализация алгоритма в виде программ для ЭВМ

Целью этапа является решение задачи аналитически
либо решение задачи на ЭВМ.

Один из основных этапов вычислительного
эксперимента.

6. Проверка адекватности модели

Целью этапа является установление соответствия объекту и сформулированным предположениям всеми возможными способами:

- сравнением с практикой в идентичных условиях;
- сопоставление с другими подходами.

Этап проверки адекватности модели является заключительным перед ее использованием.

7. Практическое использование модели

Независимо от области применения созданной модели необходимо провести качественный и количественный анализ результатов моделирования, который позволяет:

- Выполнить модификацию рассматриваемого объекта, найти его оптимальные характеристики.
- Обозначить область применения модели.
- Проверить обоснованность гипотез, принятых на этапе математической постановки, оценить возможность упрощения модели с целью повышения ее эффективности при сохранении требуемой точности.
- Показать, в каком направлении следует развивать модель в дальнейшем.

Принципы построения математических моделей

- **Дедуктивный** (от общего к частному). При заданных предположениях известная модель приспособливается к условиям моделируемого объекта. Пример – модель свободно падающего тела на основе известного закона Ньютона, где в качестве допустимого приближения принять модель равноускоренного движения для малого промежутка времени.
- **Индуктивный** (от частного к общему). Подход предполагает выдвижение гипотез, декомпозицию сложного объекта, анализ, затем синтез. Широко используется подобие, аналогичное моделирование, умозаключение с целью формирования каких-либо закономерностей в виде предположений о поведении системы. Пример – моделирование строения атома (модели Томсона, Резерфорда, Бора).

Подходы к построению математических моделей

- Фундаментальные законы природы.
- Вариационные принципы.
- Применение аналогий.
- Иерархический подход.
- Блочный принцип.

Подход – фундаментальные законы природы

Заключается в применении фундаментальных законов природы к конкретной ситуации, поскольку их обоснованность не вызывает сомнений.

- Общепризнанны.
- Многократно подтверждены опытом.
- Служат основой множества научно-технических достижений.

Наиболее распространенный подход построения моделей.

Сложность возникает с тем, какой закон следует применять в данном случае и как это делать.

Подход – вариационные принципы

Заключается в применении так называемых вариационных принципов, которые представляют собой общие утверждения о рассматриваемом объекте и показывают, что из всех возможных вариантов его поведения выбираются лишь те, которые удовлетворяют определенному условию.

Преимущества:

- Широта и универсальность сопоставима с возможностями, даваемыми фундаментальными законами.
- В определенной степени можно отвлекаться от конкретной природы процесса.

Сформулированные применительно к какому-либо классу явлений вариационные принципы позволяют единообразно строить соответствующие математические модели.

Подход – применение аналогий

Заключается в использовании аналогий с уже изученными явлениями. Применяется когда:

- невозможно прямо указать фундаментальные законы или вариационные принципы какого-либо объекта, которым он подчиняется;
- вообще нет уверенности в существовании подобных законов, допускающих математическую формулировку.

Пример – простейшая модель для динамики популяций (модель Мальтуса), посредством которой можно объяснить явление радиоактивного распада.

Заключается в принципе «от простого – к сложному», когда следующий шаг делается после достаточно подробного изучения не очень сложной модели. При этом возникает цепочка (иерархия) все более полных моделей, каждая из которых обобщает предыдущие, включая их в качестве частного случая.

Применяется когда невозможно построение математических моделей объектов сразу во всей полноте, с учетом всех факторов, существенных для его поведения.

Особенности:

- Математические модели нижнего уровня достаточно простые, типовые, допускающие широкую унификацию и использование набора готовых моделей.
- Задача большой размерности сводится к ряду задач меньшей размерности.
- Задача оптимизации всей системы распадается на ряд частных задач оптимизации на различных уровнях. Общий критерий оптимизации разделяется на критерии для каждого уровня.

Подход – блочный принцип

Заключается в построении модели из отдельных логически законченных блоков, отражающих ту или иную сторону рассматриваемого процесса.

Блочный принцип построения моделей позволяет:

- разбить общую задачу построения математической модели на отдельные подзадачи и тем самым упростить ее решение;
- использовать разработанные блоки в других моделях, модернизировать отдельные блоки и заменять их на новые.

Особенности:

- Общее математическое описание модели представляет собой совокупность математических описаний отдельных блоков.
- Каждый блок математической модели может иметь различную степень детализации математического описания.
- Позволяет во многих случаях решить проблему масштабирования процессов.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Вычислительный эксперимент — новая современная технология и методология проведения теоретических исследований.

Вычислительный эксперимент — это эксперимент над математической моделью объекта на ЭВМ, который состоит в том, что по одним параметрам модели вычисляются другие ее параметры и на этой основе делаются выводы о свойствах явления, описываемого математической моделью.

Применение вычислительного эксперимента

- вычисление таких величин, которые нельзя получить из ограниченных по своим возможностям теоретических моделей;
- расширение теоретических моделей с целью получения новых эмпирических знаний;
- расширение эмпирических понятий в тех областях, где они пока не могут быть получены.

Сравнение лабораторного и вычислительного эксперимента

Лабораторный эксперимент	Вычислительный эксперимент
Образец	Модель
Физический прибор	Программа для компьютера
Калибровка	Тестирование программы
Измерение	Расчет
Анализ данных	Анализ данных

Особенности вычислительного эксперимента

- Основа – математическое моделирование.
- Теоретическая база – прикладная математика.
- Техническая база – мощные электронно-вычислительные машины.

Цикл вычислительного эксперимента

2. Разработка метода расчета

В вычислительном эксперименте в качестве методов решения всегда выбираются **алгоритмические** (совокупность цепочек алгебраических формул, по которым ведутся вычисления, и логических условий, позволяющих устанавливать последовательность применения этих формул).

При решении задачи обычно выбирают **приближенные или численные методы** (современная вычислительная математика).

Погрешности результатов решения задачи при применении численных методов:

- ◎ **Неустраняемая погрешность**, связанная с неточным заданием исходных данных.
- ◎ **Погрешность метода**, связанная с переходом с дискретному аналогу исходной задачи.
- ◎ **Ошибка округления**, связанная с конечной разрядностью чисел на компьютере.

- ⊙ Интерполяция и численное дифференцирование.
- ⊙ Численное интегрирование.
- ⊙ Определение корней линейных и нелинейных уравнений.
- ⊙ Решение систем линейных уравнений.
- ⊙ Решение систем нелинейных уравнений.
- ⊙ Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений.
- ⊙ Решение краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.
- ⊙ Решение уравнений в частных производных.
- ⊙ Решение интегральных уравнений.

Вычислительный алгоритм

Численный или приближенный метод реализуется всегда в виде **вычислительного алгоритма**.

Для одной и той же математической задачи может быть предложено большое количество вычислительных алгоритмов.

Требования, предъявляемые к вычислительным алгоритмам:

- Реализуемость, т.е. обеспечивать решение задачи за допустимое машинное.
- Точность, т.е. возможность получения решения исходной задачи с заданной точностью и за конечное число действий.
- Экономичность (эффективность), т.е. выполнение меньшего числа действий для достижения одинаковой точности.
- Устойчивость, т.е. в процессе вычислений не возрастающая погрешность.

3. Программирование

Целью этапа является создание программы для реализации разработанного алгоритма на компьютере.

Современное программирование является самостоятельной наукой со своими фундаментальными принципами, подходами и методами.

Особенности этапа:

- Значительные временные затраты на доведение математических моделей до программных комплексов (минимум 3-5 лет).
- Необходима хорошо продуманной стратегии развития ПО для обеспечения модульности и совместимости по входным и выходным параметрам.
- Знание современных алгоритмических языков, технологий программирования и возможностей вычислительной техники.

Этапы процесса создания программного обеспечения

- ◎ Составление технического задания на разработку ПО.
- ◎ Проектирование структуры программного комплекса.
- ◎ Кодирование алгоритма.
- ◎ Тестирование и отладка.
- ◎ Сопровождение и эксплуатация.

Современные технологии программирования

- ◎ структурные;
- ◎ абстрактные;
- ◎ объектно-ориентированные;
- ◎ визуальные.

4. Проведение расчетов на компьютере

Особенности:

- Специалисты по вычислительному эксперименту с помощью компьютера рассчитывают исследуемые характеристики.
- Результат представлен в виде некоторой цифровой информации, которую затем предстоит расшифровать.
- Точность информации, которую дает вычислительный эксперимент, определяется достоверностью самой модели.
- Проводятся тестовые испытания для того, чтобы «отладить» программу и проверить адекватность математической модели.

5. Обработка результатов расчета

Особенности:

- Выполняется всесторонний анализ результатов расчета.
- Определяется необходимость уточнения модели.

Данный этап аналогичен 6-му этапу построения математической модели.

Дополнительные этапы построения мат. модели и выч. эксперимента

- Проведение натурного эксперимента для получения данных, необходимых для уточнения модели.
- Накопление экспериментальных данных.
- Построение развитой математической модели.
- Автоматическое построение программной реализации математической модели.
- Автоматизированное нахождение численного решения.
- Автоматизированное преобразование вычислительных результатов в форму, удобную для анализа.
- Принятие решения о продолжении натуральных экспериментов.

Преимущества вычислительного эксперимента

- Возможность исследования объекта без модификации установки или аппарата.
- Возможность исследования каждого фактора в отдельности, в то время как в реальности они действуют одновременно.
- Возможность исследования нереализуемых на практике процессов.

Области применения мат. моделирования и вычислительного эксперимента

- **Энергетика.** Прогнозирование атомных и термоядерных реакторов на основе детального математического моделирования происходящих в них физических процессов.
- **Космическая техника.** Расчет траекторий летательных аппаратов, задачи обтекания, системы автоматического проектирования. Обработка данных натурального эксперимента: радиолокационных данных, изображений со спутников, диагностика плазмы.
- **Материаловедение.** Получение кристаллов и пленок для создания вычислительной техники; моделирования теплового режима конструктивных узлов перспективных ЭВМ, процессов лазерной плазмы, технологии создания материалов с заданными свойствами.
- **Экология.** Вопросы прогнозирования и управления экологическими системами могут решаться лишь на основе математического моделирования, поскольку эти системы существуют в «единственном экземпляре».
- **Гео– и астрофизические явления.** Моделирование климата, долгосрочный прогноз погоды, землетрясений и цунами, моделирование развития звезд и солнечной активности, фундаментальные проблемы происхождения и развития Вселенной.
- **Химия.** Расчет химических реакций, определение их констант, исследование химических процессов на макро – и микроуровне для интенсификации химической технологии.
- **Биология.** Изучение фундаментальных проблем генетики и морфогенеза и разработка новых методов биотехнологии.

- Определены этапы построения математической модели.
- Изучены подходы к построению математических моделей.
- Описан блочный принцип построения математических моделей.
- Рассмотрено понятие вычислительный эксперимент. Определены его основные этапы.
- Изучены преимущества и сферы применения вычислительного эксперимента.

- Самарский, А.А. Математическое моделирование / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – М.: Наука. Физматлит, 1997.
- Тарасевич, Н.Н. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс / Н.Н. Тарасевич. – М.: Эдиториал УРСС, 2001.
- Введение в математическое моделирование: уч. Пособие / под редакцией П.В. Трусова. – М.: Университетская книга, Логос, 2007. – 440 с.
- Краснощеков, П.С. Принципы построения моделей / П.С. Краснощеков, А.А. Петров. – М.: МГУ, 1983. – 264 с.
- Попов, Ю.П., Вычислительный эксперимент / Ю.П. Попов, А.А. Самарский. – М.: Знание, 1983. – 64 с.