



Уральский
федеральный
университет

С.В. Звонарев

Основы математического моделирования

Лекция № 4. Имитационное моделирование. Примеры математических моделей

Екатеринбург
2012

- 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.

- 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 – 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 – 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

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



Одним из механических приборов для получения случайных величин является рулетка.

- ◎ **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.

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 $n_1=9876$. Возведем его в квадрат, выберем 4 средние цифры и обозначим $n_2=5353$. Продолжая указанные рекуррентные действия будем иметь n_3 , n_4 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 быстроедействие.
- ◎ 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 предположений 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

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:

- ◎ Универсальность.
- ◎ Не требует большого объема памяти.

Недостатки:

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

Математические модели в физике



*Симон
Лаплас*



Эрвин Шредингер

- Одна из первых линейных моделей – закон Гука

$$F = -kx$$

- Уравнение Лапласа – уравнение в частных производных в трехмерном пространстве

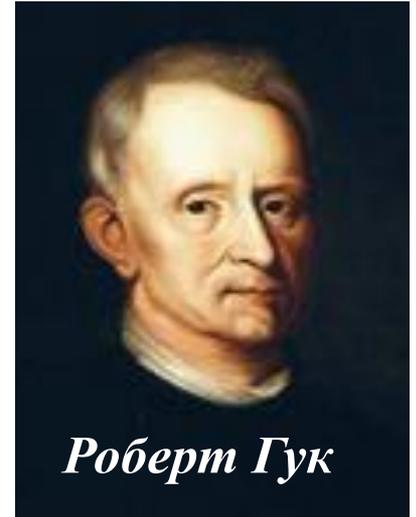
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0$$

- Уравнения Максвелла для электромагнитного поля

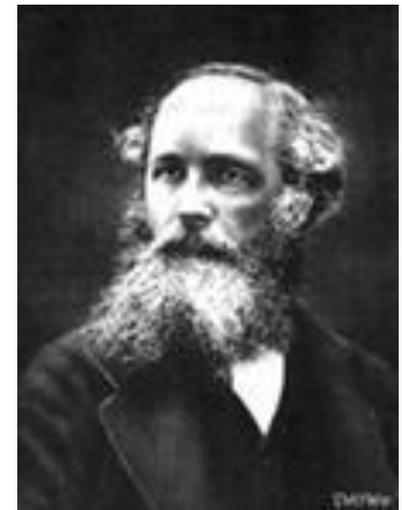
$$\nabla \cdot D = \rho, \quad \nabla \times E = -\frac{dB}{dt}, \quad \nabla \cdot B = 0, \quad \nabla \times H = j + \frac{dD}{dt}$$

- Фундаментальное уравнение волновой и квантовой механики – уравнение Шредингера

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



Роберт Гук



*Джеймс Клерк
Максвелл*²³

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

- ⊙ 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.

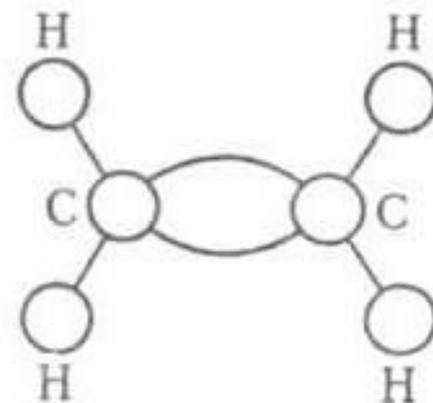
Математическая химия – раздел теоретической химии, посвященный новым применениям математики к химическим задачам. Основная область интересов – это математическое моделирование гипотетически возможных физико-химических и химических явлений и процессов, а так же их зависимость от свойств атомов и структуры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



- ◎ Закон действующих масс - математик К. Гульдбергом и химик-экспериментатор П. Вааге.

К.М. Гульдберг (слева) и П. Вааге.

- ◎ Граф механизма химических превращений и дифференциальные уравнения химической кинетики.



Якоб Хендрик Вант-Гофф

- 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).

◎ **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.

- ◎ **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 Поллом 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. МакКаллока и У. Питса). Модель основана на теории нервных сетей.
 - ◎ **Модель биоценозов** на основе системы дифференциальных и интегральных уравнений (В. Вольтерра, А. Н. Колмогоров).



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. Кимура.

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

- ◎ 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.

Заключение и выводы

- Изучены цель, виды и области применения имитационного моделирования.
- Подробно рассмотрены метод статистического моделирования и метод Монте-Карло.
- Описаны примеры построения математических моделей в различных областях: физике, химии и биологии.

Рекомендуемая литература

- 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.
- Пытьев, Ю.П. Методы математического моделирования / Ю.П. Пытьев. – М.: Физматлит, 2004.