Бозоров Э.Х., Кубаев А.Э

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ,
НАУКИ И ИННОВАЦИЙ РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН

САМАРКАНДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
МЕДИЦИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ АН УЗБЕКИСТАН

Бозоров Э.Х
Кубаев А.Э

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Учебно-методическое пособие

Самарканд – 2024

УДК: 616.9

Бозоров Э.Х., Кубаев А.Э. Построение математической модели. Учебно-методическое пособие. – Самарканд: Издательство «СамГИИЯ», 2024. – 46 стр.

Учебно- методическое пособие составлен на основе лекционного курса "основы математического моделирования", который преподается бакалаврам направления методическое применение - математическое моделирование. Рассмотрены основные понятия математического моделирования. Представлены математические модели и принципы их построения. Описаны примеры математических моделей в физике, биологии. Пособие предназначено для студентов вузов, аспирантов и специалистов, изучающих процессы математического моделирования.

Мы благодарим авторов учебников на основе педогогического анализа материалов, написанных в рамках инновационного проекта под названием "создание мультимедийных учебников для бакалавров и магистров в областях ядерной энергетики, ядерной медицины и технологий", "радиационная медицина и технологии" № AM-PZ-2019062031.

Рецензенты: Институт ядерной физики УзР АН, старший научный сотрудник, к.ф.-м.н., доцент: **Н.Сулаймонов**

Заведующий кафедрой "Информатика, информационные технологии" Самаркандского государственного медицинского университета, доцент: **С.А.Карабаев**

Рекомендовано учебно-методическим советом СамГМУ в качестве учебно-методического пособия приказ № 3 от 1 ноября 2023 г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Различные элементы математического моделирования применялись одновременно споявлением точных наук. С данным фактом связано то, что часть из них носят имена Корифеев науки, например, Ньютона и Эйлера, а сло- во «алгоритм» происходит от имени средневекового ученого Аль-Хорезми. Второе «рождение» этой методологии пришлось на конец 40-х — начала 50-х годов XX века и было обусловлено, по крайней мере, двумя причинами: появлением компьютеров, хотя и скромных по нынешним меркам, но тем не менее избавивших ученых от огромной по объему рутинной вычислительной работы, и беспрецедентным социальным заказом на выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита, которые не могли быть реализованы традиционными методами. Спомощью математического моделирования данная задача была решена. Напервом этапе ядерные взрывы и полеты ракет моделировались посредством ЭВМ, ауже впоследствии были реализованы напрактике. Данный факт способствовал дальнейшему развитию методологии моделирования, без который в настоящее время не реали- зуется ниодни крупномасштабный технологический, экологи- ческий или экономический проект.

Технические, экологические, экономические и иные си- стемы, изучаемые современной наукой, больше не поддают- ся исследованию обычными теоретическими методами. Прямой натурный эксперимент над ними долог, дорог, часто либо опасен, либо попросту невозможен, так как многие из этих си- стем существуют в «единственном экземпляре». Цена ошибок и просчетов в обращении с ними недопустимо высока. По этому математическое моделирование является неизбежной составляющей научно-технического прогресса.

Математическое моделирование, являясь методологией, используется как инструмент внаучных дисциплинах подобно математике, физике и биологии и не конкурирует с ними. Практически во всех сферах творческой деятельности применяется моделирование, начиная от исследователей и заканчивая военачальниками. Математическое моделирование должно обеспечиваться выполнением следующих требований: четкая формулировка основных понятий и предположений, основанная наопыте (апостериорный), анализ адекватности используемых моделей, гарантированная точность вычислительных алгоритмов и т.д. При моделировании трудноформализуемых объек- тов нужно дополнительно учитывать разграничение математических и нематематических терминов, а также особенности использования существующего математического аппарата к из- учению объектов.

1. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

1.1. Этапы построения математической модели

Построение математических моделей является достаточно трудным процессом, включающим большие зараты материальных и временных ресурсов, а также

предполагает необходимость в специалистах высокого уровня с компетенциями как в предметной области, так и в таких областях, как прикладная математика, численные методы, программирование, современные вычислительные системы.

Среди этапов процесса построения моделей можно выделить следующие (см. рис. 13)

1. *Обследование объекта моделирования и формулировка технического задания на разработку модели.* Конструирование модели начинается со словесно-смыслового описания объекта или явления. Данная стадия содержит сведения общего характера о природе объекта, информацию о целях его исследования и некоторые предположения. Данный этап можно также назвать формулировкой предмодели. Цель этапа — разработка содержательной постановки задачи моделирования, т.е. созда ние совокупности вопросов об объекте моделирования, записанных в словесной форме.

2. *Концептуальная и математическая постановка задачи.* На этом этапе происходит завершение идеализации объекта, отбрасываются несущественные факторы иэффекты. Цель концептуальной постановки задачи заключается в формулировке основных вопросов и наборе гипотез касательно свойств и поведения объекта моделирования в терминологии специальных дисциплин. В итоге предположения описываются математи- чески для количественного анализа их выполнения. На этапе составления математического описания предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте и затем

устанавливают связи между ними. Далее для каждого выделенного элемента и явления записывают уравнение, отражающее его функционирование. Кроме того, в математическое описание включают уравнения связи между различными выделенными явлениями. В зависимости от процесса математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных уравнений. Процесс получения совокупности математических уравнений, однозначно описывающих объект моделирования, называется математической постановкой задачи моделирования.

3. *Качественный анализ и проверка корректности модели.* Для контроля правильности полученной системы математических соотношений требуется проведение ряда обязательных проверок:

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

Понятие «корректность модели» очень важно, особенно в прикладной математике, поскольку невозможно применение численных методов к некорректно поставленным задачам. Уста новить корректность математической задачи является слож- ной задачей. Для обеспечения корректности математической модели должны быть выполнены все контрольные проверки.

На этом этап построения математической модели заканчивается и далее следует «вычислительный эксперимент», однако многие авторы и следующие этапы относят к процессу построения математической модели, в связи с чем обсуждение понятия «вычислительный эксперимент» будет рассмотрено ниже.

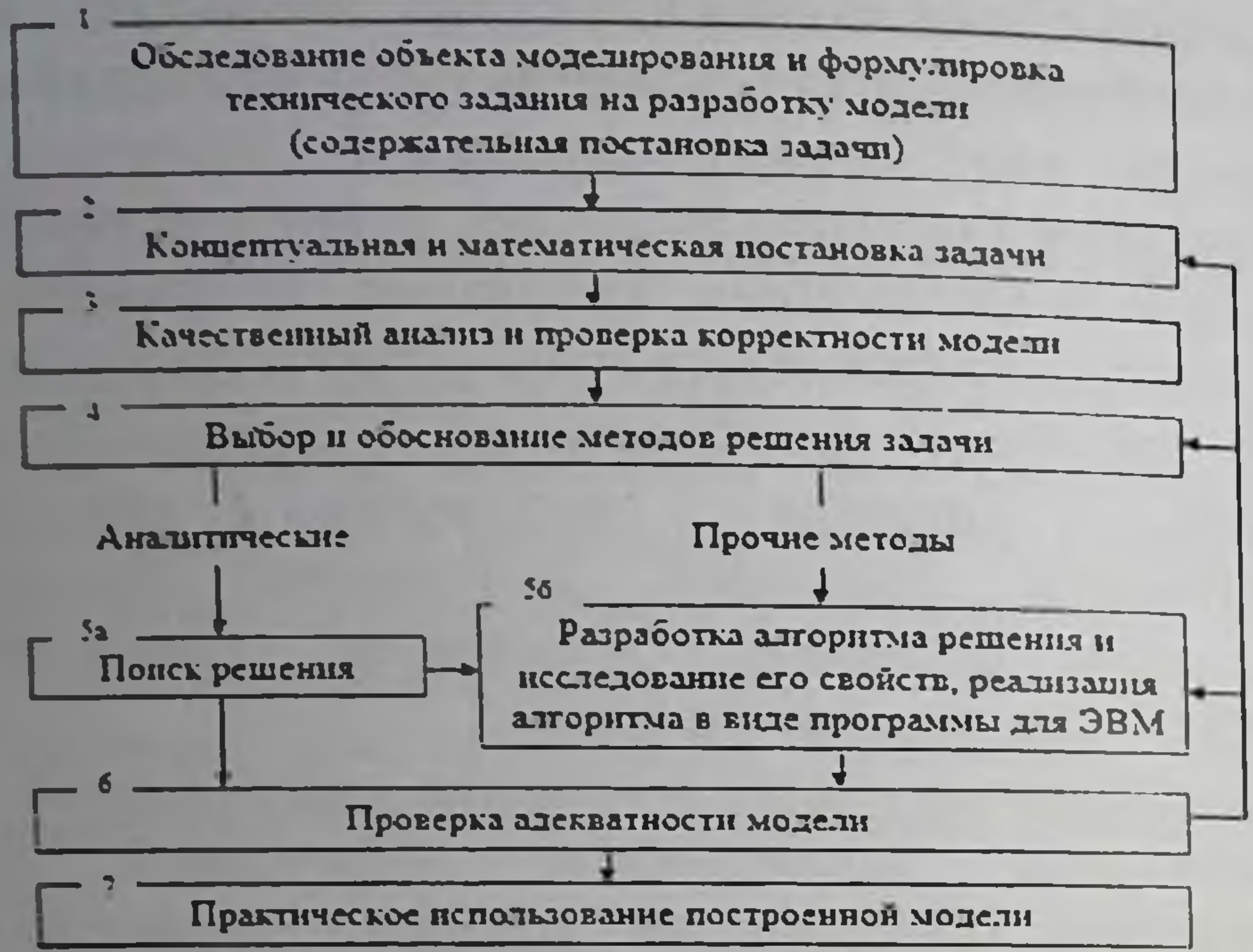

Рис. 13. Этапы построения математической модели

4. Выбор и обоснование выбора методов решения задачи. Созданная модель исследуется любыми возможными методами, в том числе с взаимной проверкой. Поскольку не все модели решаются теоретически, в последнее время широко используются вычислительные методы. Данное обстоятельство важно при анализе нелинейных объектов, поскольку качественное пове дение таких объектов неизвестно. В зависимости от метода решения задачи все методы подразделяются на:

 аналитические. Данные методы являются подходящими для анализа результатов, однако они применимы только для относительно простых моделей. При наличии анали- тического решения задачи численное решение практиче- ски не применяется;

 алгоритмические. Для алгоритмических методов реализуется вычислительный эксперимент с использованием компьютера.

Этап выбора метода решения и разработки моделирующей программы подразумевает выбор наиболее эффективного (по быстроте получения решения и его наибольшей точности) метода решения из имеющихся методов, реализацию его в форме алгоритма решения.

5. *Поиск решения или реализация алгоритма в виде программ для ЭВМ.* Данный этап будет рассмотрен при описании вычислительного эксперимента.

6. *Проверка адекватности модели.* На данном этапе определяется соответствие объекту и сформулированным предположениям. При этом также выполняется исследование модели на достижение поставленной цели любыми способами, например, сравнение с экспериментом или сопоставление с другими под- ходами. Модель необходимо отбросить или модифицировать в случае получения с ее помощью результата, существенно отличающегося от истинного. Этап установления степени соответ- ствия модели объекту является заключительным. Для проверки адекватности математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерений на объекте в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях.

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.

1.2. Подходы к построению математических моделей

При построении моделей используют два принципа:

- дедуктивный (от общего к частному);
- индуктивный (от частного к общему).

При первом подходе рассматривается частный случай общеизвестной фундаментальной модели. Здесь при заданных предположениях известная модель приспосабливается к условиям моделируемого объекта. Например, можно построить модель свободно падающего тела на основе известного закона Ньютона и в качестве допустимого приближения принять модель равноускоренного движения для малого промежутка времени. Второй способ предполагает выдвижение гипотез, деком- позицию сложного объекта, анализ, затем синтез. Здесь широко используется подобие, аналогичное моделированию, умозаключение сцелью формирования какихлибо закономерностей в виде предположений о поведении системы. Например, подобным способом происходит моделирование строения атома.

Вспомним модели Томсона, Резерфорда, Бора.

Среди подходов к разработке математических моделей относят:

1. Фундаментальные законы природы. Данный принцип является самым распространенным изаключается виспользовании фундаментальных законов природы применительно кконкретной ситуации. Как правило, законы признанны, доказаны опытом и являются базой научно-технических достижений. В этой связи нет необходимости в их дополнительной обоснованности. В итоге самый главный вопрос возникает при выборе конкретного закона для решения определенной задачи.

2. Вариационные принципы. Данный подход пошироте иуни- версальности сравним спервым подходом изаключается вприменении вариационных принципов, которые являются утверждениями об исследуемом объекте. При этом выбор вариантов поведения осуществляется на основании определенных условий. Полученные вариационные принципы для класса явлений позволяют единообразно создавать соответствующие математические модели. Данный подход позволяет не учитывать конкретную природу процесса.

3. Применение аналогий при построении моделей. Метод аналогий применяется, когда невозможно выбрать фундаментальные законы или вариационные принципы. Это может быть свя- зано с тем, что на сегодняшний момент подобные законы могут не существовать и, следовательно, описать их математически не представляется возможным. Примером является простейшая модель для динамики популяций (модель Мальтуса), посредством которой можно объяснить явление радиоактивного распада.

4. Иерархический подход к получению моделей. Построение математических моделей с учетом всех значимых факторов не всегда бывает удобным и оправданным. Подход реализации «от простого — к сложному» в этом случае является более предпочтительным. При данном подходе создается иерархия более полных моделей, обобщающих предыдущие модели как частные случаи. Математические модели нижнего уровня могут быть достаточно простыми, типовыми, допускающими широкую уни фикацию и использование набора готовых моделей. При иерар- хическом построении общей модели сложной системы задача оптимизации всей системы распадается на ряд частных задач оптимизации на различных уровнях. При этом общий критерий оптимизации разделяется на критерии для каждого уровня. Таким образом, задача большой размерности может быть сведена к ряду задач меньшей размерности. При этом следует учитывать взаимное влияние элементов и уровней.

5. Блочный принцип. При построении математических моделей широко используют блочный принцип. Модель строится из отдельных логически законченных блоков, отражающих ту или иную сторону рассматриваемого процесса. Блочный прин- цип построения моделей позволяет: разбить общую задачу по- строения математической модели на отдельные подзадачи и тем самым упростить ее решение, а также использовать разрабо- танные блоки в других моделях, модернизировать отдельные блоки и заменять их на новые. Общее математическое описа- ние модели представляет собой совокупность математических описаний отдельных блоков. Применение блочного принципа построения математических моделей позволяет во многих слу- чаях решить проблему масштабирования процессов.

Принципиально каждый блок математической модели может иметь различную степень детализации математического описания. Важно лишь, чтобы входные и выходные перемен- ные всех блоков модели находились во взаимном соответствии, что обеспечит получение замкнутой системы уравнений математической модели процесса в целом. В идеале математическое описание каждого блока должно включать уравнения, параметрами которых являются только физико-химические свойства веществ. При практическом использовании блочного принци- па в математическом описании каждого блока на том или ином уровне его детализации приходится применять эмпирические соотношения.

1.3. Вычислительный эксперимент

Обычно моделирование используется для вычисления таких величин, которые нельзя получить из ограниченных по своим возможностям теоретических моделей. Если теория дает желаемые количественные выводы, то моделирование вряд ли необходимо. Но моделирование часто применяется и для расширения теоретических моделей с целью получения новых эмпирических знаний, а также для расширения эмпирических понятий в тех областях, где они пока не могут быть получены. В этом случае большая роль принадлежит вычислительному эксперименту. За счет решения различных химических, физических, биологических и других задач теоретический анализ преобразовался в новую методологию проведения исследований, которая называется вычислительный эксперимент. В табл. 1 показано сравнение лабораторного и вычислительного эксперимента.

Таблица 1

Аналогии между вычислительным и лабораторным экспериментом

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

Ни одно техническое достижение неповлияло так наинтелектуальную деятельность человека, как электронновычислительные машины. Появление компьютеров привело к невероятным изменениям в производительности интеллектуального труда засчет роста скорости выполнения арифметических илогических операций с помощью ЭВМ. В начале XXI века появилась реальная возможность использовать их в научных ис следованиях не только в качестве больших арифмометров, но и обратиться с их помощью к изучению таких разделов математики, которые ранее были практически не доступны для исследований. Это было понятно еще при решении на несо- вершенных ЭВМ сложных математических задач ядерной физики, баллистики, прикладной небесной механики.

Основа вычислительного эксперимента — это математическое моделирование, теоретическая база данного процесса — прикладная математика, а техническое обеспечение — это мощные электронно-вычислительные машины. При применении вычислительного эксперимента просматриваются как общие основные черты данного процесса, так и специфические осо- бенности конкретных задач.

Научное исследование реального процесса можно проводить теоретически или экспериментально независимо друг от друга. Такой путь познания истины носит односторонний характер. В современных условиях развития науки и техники стараются проводить комплексное исследование объекта.

Вычислительный эксперимент — это эксперимент над мате- матической моделью объекта на ЭВМ, который состоит в том, чтобы по одним параметрам модели вычислить другие ее пара- метры и на этой основе сделать выводы о свойствах явления, описываемого математической моделью.

Вычислительный эксперимент представляет собой цикличе- ский процесс, состоящий из следующих этапов (рис. 14):

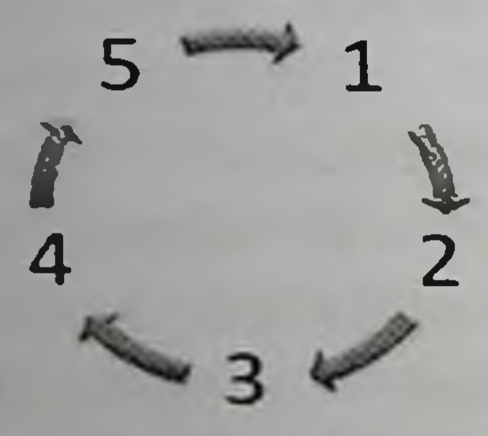

Рис. 14. Схема технологического цикла вычислительного эксперимента:

1 — построение математической модели; 2 — разработка метода расчета;

3 — программирование; 4 — расчеты на компьютере; 5 — сравнение результатов расчетов с данными опыта, уточнение моделей

1. *Построение математической модели.* На первом этапе производится выбор физической модели, для которой определяются обязательные для рассмотрения факторы и второстепенные, которыми можно пренебречь. При этом определяются допущения или ограничения модели, в рамках которых результаты моделирования можно считать корректными. Данная модель формулируется с помощью дифференциальных или интегродифференциальных уравнений, т.е. на основе математических терминов. Этот этап подробно рассмотрен выше, при описании процесса

построения математической модели.

2. *Создание метода расчета.* В вычислительном эксперименте всегда используется алгоритмический метод решения, представляющий последовательность алгебраических формул и логических операторов. При этом для одной математической задачи могут существовать различные вычислительные алгоритмы. Подобные задачи решаются как приближенными, так и численными методами. Вследствие применения указанных методов возникают погрешности, которые подразделяются на три типа:

□□ Неустранимая погрешность, связанная с неточным заданием исходных данных.

□□ Погрешность метода, связанная с переходом к дискрет- ному аналогу исходной задачи.

□□ Ошибка округления, связанная с конечной разрядностью чисел на компьютере.

Как численный, так и приближенный метод решения предполагают запись в виде вычислительного алгоритма. Требования, предъявляемые к алгоритмам, в том числе и к вычислительным алгоритмам:

□□ Реализуемость, т.е. обеспечение решения задачи за допустимое машинное время.

□□ Точность — получение решения исходной задачи с определенной погрешностью и за конечное число операций.

□□ Экономичность (эффективность), т.е. выполнение меньшего числа действий для достижения одинаковой точности.

□□ Устойчивость, т.е. в процессе вычислений не должна возрастать погрешность.

Для создания наиболее точных вычислительных алгоритмов необходимо формировать многочисленные модификации с учетом специфических особенностей конкретной математической задачи. Можно выделить следующие группы численных методов в зависимости от объектов, к которым они применяются:

□□ 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.

Выбор метода для решения конкретной задачи представляется достаточно сложным в силу существования большого количества численных методов. Для реализации модели возможно применение различных альтернативных алгоритмических методов. В этой связи выбор метода решения осуществляется в зависимости от обеспечения наилучшей эффективности, устойчивости и точности результатов.

3. *Разработка программы* на основе алгоритма для реализа- ции на компьютере. Создание надежного и функционального программного обеспечения (ПО) является, может быть, даже более сложным в сравнении с предыдущими этапами. Реализа- ция на данном этапе зависит от знания современных алгорит- мических языков, технологий и языков кодирования и ресурса вычислительных систем. Современное программирование является самостоятельной наукой со своими фундаментальными принципами, подходами и методами. В этой связи программ ный комплекс является сложной системой, содержащей язы- ки программирования, трансляторы, компиляторы и библиотеки стандартных модулей. Процесс разработки программ можно разделить на следующие этапы:

□□ создание технического задания;

□□ разработка структуры программы; □□ математическое описание;

□□ алгоритмизация;

□□ кодирование на программном языке; □□ тестирование и отладка;

- сопровождение и эксплуатация.

Процесс от разработки математических моделей до создания программ в среднем занимает 3–5 лет. Для создания конечного программного комплекса необходимо продумать стратегию развития ПО, обеспечить его модульность, а также согласованность входных и выходных параметров. Среди современных технологий программирования выделяют следующие:

- структурное программирование;
- абстрактное программирование;
- объектно-ориентированное программирование;
- визуальное программирование.

4. *Проведение расчетов на компьютере.*

Здесь наиболее отчетливо проявляется сходство с натурным экспериментом. Различие в том, что в лаборатории экспериментатор с помощью специально построенной установки «задает вопросы» приро- де, в то время как специалисты по вычислительному эксперименту с помощью компьютера ставят эти вопросы математической модели. Ответ в обоих случаях получается в виде некоторой цифровой информации, которую затем предстоит расшифровать. Следует заметить, что достоверность модели обеспечи- вается точностью информации при вычислительном эксперименте. Именно по этой причине проводят тестовые испытания. Они необходимы для того, чтобы «отладить» программу и проверить адекватность математической модели.

5. *Обработка результатов расчетов.* На этом этапе выполня- ется всесторонний анализ результатов расчета и выводы, после которых или становится ясна необходимость уточнения моде- ли, или результаты, пройдя проверку на разумность и надеж- ность, передаются заказчику для исполнения.

Дополнительно можно продолжить классификацию следу- ющими этапами [3]:

6. Проведение натурного эксперимента для получения дан- ных, необходимых для уточнения модели.

7. Накопление экспериментальных данных.

8. Построение математической модели.

9. Автоматическое построение программной реализации ма- тематической модели.

10. Автоматизированное нахождение численного решения.

11. Автоматизированное преобразование вычислительных

результатов в форму, удобную для анализа.

12. Принятие решения о продолжении натурных экспериментов.

Тем самым основу вычислительного эксперимента составляет триада: модель — алгоритм — программа. Опыт решения крупных задач показывает, что метод математического моделирования и вычислительный эксперимент соединяют в себе преимущества традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования. Видоизмененная цепочка, реализованная в виде единого программного комплекса, и составляет «технологию» вычислительного эксперимента.

К основным преимуществам вычислительного эксперимента можно отнести следующие:

 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.

Вычислительный эксперимент посредством математического моделирования находит все новые и новые применения в раз- личных областях науки и техники:

 Энергетическая проблема. Задачи атомной промышленности эффективно решаются с помощью математического моделирования. В частности, при исследовании физических процессов, происходящих в атомных и термоядерных реакторах, используется вычислительный эксперимент, который при совокупности с натурным экспериментом ускоряет и упрощает исследования в данной области.

□□ *Космическая техника.* Математическое моделирование ис- пользуется для расчета движения летательных средств, задач аэродинамического сопротивления, а также для анализа радиолокационных данных, например, изображений соспутников. Ключевую роль вданном случае играет проблема повышения качества измерительной аппаратуры. Установлено, что измерительный прибор в связке с ЭВМ может получить результаты, сравнимые с приборами самого высокого качества. В итоге совокупность измерительных и вычислительных средств позволяет выходить на новый уровень решения задач.

□□ *Технологические процессы.* Задачи синтеза материалов, в том числе с заданными свойствами, разработка вычислительной техники и элементной базы, анализ технологических режимов конструкций, процессов лазерной плазмы решаются в настоящее время с помощью математического моделирования.

□□ *Экологические проблемы.* В данной области математическое моделирование позволяет решать такие вопросы, как прогнозирование и управление экологическими системами, поскольку они могут быть единичными.

□□ *Гео- и астрофизические явления.* Исследование климата, прогнозирование различных стихийных бедствий, а также изучение развития звезд и происхождения Вселенной невозможно без математического моделирования.

□□ *Химия.* Математическое моделирование применяется для расчета химических реакций иизучения химических процессов на различных уровнях.

□□ *Биология.* Наибольший интерес к моделированию вызван необходимостью решения фундаментальных проблем генетики иморфогенеза, атакже созданием новых перспективных методов биотехнологии.

1.4. Имитационное моделирование

В настоящее время несуществует единой точки зрения повопросу о том, что понимать под имитационным моделированием. Определений термина «имитационное моделирование» кнастоящему времени существует большое количество .

Имитационное моделирование — метод, позволяющий строить модели, описывающие процессы так, как они проходилибы в действительности. Такую модель можно «проиграть» во вре- мени как для одного испытания, так изаданного их множества. При этом результаты будут определяться случайным характе- ром процессов. По этим данным можно получить достаточно устойчивую статистику.

Другое определение: *имитационное моделирование* — это 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.

Существует класс объектов, для которых поразличным причинам не разработаны аналитические модели, либо не разработаны методы решения полученной модели. В этом случае математическая модель заменяется имитатором или имитаци- онной 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, авто матов, сетей и т.п.), которые определяют, в какое состояние система перейдет в будущем из заданного текущего состояния.

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 — 1960-х годах. Цель имитационного моделирования состоит в воспроизведении поведения исследуемой системы на основе результатов анализа наиболее существенных взаимосвязей между ее элементами или, другими словами,— в разработке симулятора исследуемой предметной области для проведения различных экспериментов.

К имитационному моделированию прибегают, когда:

- дорого или невозможно экспериментировать на реальном объекте;
- невозможно построить аналитическую модель: в системе есть время, причинные связи, последствие, нелинейности, стохастические (случайные) переменные;
- необходимо имитировать поведение системы во времени. Попробуем проиллюстрировать процесс имитационного моделирования через сравнение с классической математической моделью. При построении математической модели сложной системы может возникнуть ряд трудностей. Модель, как правило, содержит большое число параметров, много связей между элементами и разнообразные нелинейные ограничения, реальные системы зачастую подвержены влиянию случайных различных факторов, учет которых аналитическим путем представляет весьма большие трудности, зачастую непреодолимые при большом их числе. Эти трудности и обуславливают применение имитационного моделирования. Основным преимуществом имитационного моделирования по сравнению с аналитическим является возможность решения более сложных задач. Имитационные модели позволяют достаточно просто учитывать такие факторы, как наличие дискретных и непрерывных элементов, нелинейные характеристики элементов системы, многочисленные случайные воздействия и другие, которые часто создают трудности при аналитических исследованиях.

В настоящее время имитационное моделирование—

наиболее эффективный метод исследования систем, а часто и единственный практически доступный метод получения информации о поведении си- стемы, особенно на этапе ее проектирования.

В имитационном моделировании различают два метода:

- метод статистического моделирования;
- метод статистических испытаний (Монте–Карло).

Метод Монте–Карло — численный метод, который применяется для моделирования случайных величин и функций, вероятностные характеристики которых совпадают с решениями аналитических задач. Состоит в многократном воспроизведении процессов, являющихся реализациями случайных величин и функций, с последующей обработкой информации методами математической статистики.

Если этот прием применяется для машинной имитации в целях исследования характеристик процессов функционирования систем, подверженных случайным воздействиям, то такой метод называется *методом статистического моделирования.* Метод имитационного моделирования применяется для оценки вариантов структуры системы, эффективности различных алгоритмов управления системой, влияния изменения различных параметров системы. Имитационное моделирование 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.

1.4.1. Статистическое моделирование

Статистическое моделирование— 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 . Вданном методе искомую величину представляют математическим ожиданием числовой функции от случайного исхода явления, т.е. интегралом по вероятностной мере. Проведение каждого «эксперимента» распа- дается на две части: «розыгрыш» случайного исхода и последу- ющее вычисление функции. Когда пространство всех исходов ивероятностная мера слишком сложны, розыгрыш проводится последовательно внесколько этапов. Случайный выбор накаждом этапе проводится с помощью случайных чисел, например, генерируемых каким-либофизическимдатчиком;

употребитель- на также их арифметическая имитация— псевдослучайные числа. Аналогичные процедуры случайного выбора используются в математической статистике и теории игр.

Статистическое моделирование широко применяется для решения на ЭВМ интегральных уравнений, например, при исследовании больших систем. Они удобны своей универсальностью, как правило, нетребуют большого объема памяти. Недостаток— большие случайные погрешности, слишком медленно убывающие при увеличении числа экспериментов. Поэтому разработаны приемы преобразования моделей, позволяющие понижать разброс наблюдаемых величин и объем модельного эксперимента.

1.4.2. Метод Монте–Карло

При существовании теоретического описания метода напротяжении длительного периода времени метод Монте–

Карло получил широкое распространение только спозвлением ЭВМ, т.е. задача генерации и использования в расчетах случайных вели- чин достаточно трудоемкая задача.

Метод Монте–Карло — общее название группы численных методов, основанных наполучении большого числа реализаций стохастического (случайного) процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали саналогичными величинами решаемой задачи . Название метода происходит отодноименного города вкняже- стве Монако, где развита игорная индустрия, поскольку наи- более простым механическим устройством для генерации случайных величин является рулетка.

История метода Монте–Карло

Возникновение идеи использования случайных явлений в области приближенных вычислений принято относить к 1878 году, когда появилась работа Холла об определении чис- ла □□с помощью случайных бросаний иглы на разграфленную параллельными линиями бумагу. Существо дела заключается в том, чтобы экспериментально воспроизвести событие, вероятность которого выражается через число □, и приближенно оценить эту вероятность. Метод Монте–Карло был впервые предложен в 1949 г. Метрополисом и Уламом в статье «Метод Монте–Карло» американского журнала ассоциации статистиков. Создателями метода считают Дж. Неймана и С. Улама. Отечественные работы по методу Монте–Карло появились в 1955–1956 годах. С того времени накопилась обширная библиография по методу Монте–Карло. Даже беглый просмотр названий работ позволяет сделать вывод о применимости метода Монте–Карло для решения прикладных задач из большого числа областей науки и техники.

Первоначально метод Монте–Карло использовался главным образом для решения задач нейтронной физики, где традиционные численные методы оказались мало пригодными. Далее его влияние распространилось на широкий класс задач статистической физики, очень разных по своему содержанию. Метод Монте–Карло оказал и продолжает оказывать существенное влияние на развитие методов вычислительной мате- матики (например, развитие методов численного интегрирования) и при решении многих задач успешно сочетается с другими вычислительными методами и дополняет их. Его применение оправдано в первую очередь в тех задачах, которые допускают теоретико-вероятностное описание. Это объясняется как есте- ственностью получения ответа с некоторой заданной вероятностью в задачах с вероятностным содержанием, так и существенным упрощением процедуры решения.

Принципы получения случайных величин на ЭВМ

Наиболее простым механизмом получения случайных величин является рулетка, где неподвижная стрелка в момент остановки вращающегося диска с цифрами указывает на конкретное значение случайной величины.

Циклическим процессом запуска и остановки рулетки с по следующим объединением полученных в каждом цикле цифр в группы можно составлять таблицу случайных цифр. Более миллиона цифр содержит самая большая подобная таблица.

Достаточно сложной задачей является получение таблиц случайных чисел. Для создания подобной таблицы необходима ее проверка, поскольку физический прибор генерирует отличные от равномерного распределения случайные числа. При работе с большими таблицами случайных чисел необходим большой объем памяти, который будет занимать соответствующий файл, хранящий данную таблицу.

Наиболее простым решением в данном случае было бы подключение рулетки к ЭВМ. При этом быстродействие генерации случайных чисел значительно снизится. В этой связи наиболее эффективным генератором случайных величин будут являться шумы в электронных лампах при реализации следующего алгоритма: при превышении порогового значения уровня шума четное количество раз в разряд будет устанавливаться едини- ца, в противном случае — ноль.

На практике количество генераторов равно сумме разрядов псевдослучайного числа, в которые записываются нули и единицы. При этом на каждом шаге формируется одно полноразрядное число, имеющее равномерное распределение в интервале .

Недостатки этого метода генерации:

1) Вероятное отсутствие равновероятности нулей и единиц из-за неисправности электронных генераторов шума.

2) Невозможность воспроизводимости случайной последо- вательности чисел с целью проверки работоспособности программы.

Псевдослучайные числа

Применение указанных выше датчиков в ЭВМ является достаточно дорогостоящим, поскольку случайные числа в расчетах используются редко. В качестве решения указанной проблемы возможно использование псевдослучайных чисел. Получение псевдослучайных чисел выполняет ЭВМ на основе алгоритмов и функций, заложенных в математическом опи- сании. Указанные алгоритмы и функции постоянно проверя- ются, поэтому качество генерации псевдослучайных чисел как правило обеспечивается. Однако, поскольку все действия ЭВМ заранее запрограммированы, псевдослучайные числа, получен ные таким образом, трудно назвать случайными. В целях объективного применения псевдослучайных последовательностей необходимо понимать их особенности. Определим сначала, что называется псевдослучайным числом. К таким числам относятся числа, рассчитанные, как правило, по рекуррентной формуле и удовлетворяющие ряду требований, свойственных случайной величине.

Дж. фон Нейман в 1951 г. разработал первый алгоритм создания последовательности псевдослучайных чисел, который называется метод середины квадратов, заключающийся в следующем:

Пусть задано произвольное 4-значное целое число n_1 = 5243. При возведении его в квадрат получается 8-значное число n_1^2 = 27489049. Берем 4 средние цифры из этого числа и обозначаем их как n_2 = 4890. После возведем уже новое число в квадрат n_2^2 = 23912100 и берем следующие 4 средние цифры. В результате получается число n_3 = 9121. Продолжая указанные рекуррентные действия, будем иметь n_4 = 1926; n_5 = 7094; n_6 = 3248 и т.д. Таким образом, псевдослучайная последовательность чисел записывается в следующем виде: 0,5243; 0,4890; 0,9121; 0,1926; 0,7094; 0,3248 и т.д.

Из указанного выше простого алгоритма были созданы более сложные. Однако механизм генерации последовательности псевдослучайных чисел не изменился и заключается в последо- вательном получении следующего значения из предыдущего.

Преимущества методов получения псевдослучайных чисел:

1) Скорость получения случайных чисел пропорциональ-

на быстродействию работы ЭВМ, поскольку необходимо минимальное количество простых операций для получения псевдослучайного числа.

2) Алгоритмы и программы генерации псевдослучайных чисел очень простые за счет применения рекуррентных формул.

3) Воспроизводимость последовательности псевдослучайных чисел.

4) Возможность постоянного использования последовательности псевдослучайных чисел в однотипных задачах без дополнительных процедур по их аттестации и описания изменения параметров.

Сущность метода Монте–Карло

Сущность метода Монте-Карло состоит в следующем:

требуется найти значение a некоторой изучаемой величины. Для этого выбирают такую случайную величину X, математическое ожидание которой равно:

$$M(X) = a.$$

Практически же поступают так: производят n испытаний, в результате которых получают n возможных значений X; вычисляют их среднее арифметическое $\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n}$ и принимают x в качестве оценки (приближенного значения) a^* искомого числа a:

$$a \square a^* \square \square x. - - \quad (1)$$

Поскольку метод Монте–Карло требует проведения большого числа испытаний, его часто называют методом статистических испытаний. Теория этого метода указывает, как наиболее целесообразно выбрать случайную величину X, как найти ее возможные значения. В частности, разрабатываются способы уменьшения дисперсии используемых случайных величин, в результате чего уменьшается ошибка.

Метод Монте–Карло применяется очень часто, порой некритично и неэффективным образом. Он имеет некоторые очевидные *преимущества*:

1. Он не требует никаких предложений о регулярности, за ис- ключением квадратичной интегрируемости. Это может быть полезным, так как часто случайная величина — очень сложная функция, чьи свойства регулярности трудно установить.

2. Он приводит к выполнимой процедуре даже в многомерном случае, когда численное интегрирование неприменимо, например, при числе измерений, большем 10.

3. Его легко применять при малых ограничениях или без предварительного анализа задачи.

Он обладает, однако, некоторыми *недостатками*, а именно:

1. Границы ошибки не определены точно, но включают

некую случайность. Это, однако, более психологическая, чем реальная, трудность.

2. Статическая погрешность убывает медленно.

3. Необходимость иметь случайные числа.

Оценка погрешности метода Монте–Карло

Пусть для получения оценки a^* математического ожидания M случайной величины X было произведено n независимых испы- таний (разыграно n возможных значений X) и по ним была най- дена выборочная средняя x, которая принята в качестве искомой оценки: a^* □□x. Ясно, что если повторить опыт, то будут получены другие возможные значения X, следовательно, другая средняя, а значит, и другая оценка a^*. Уже отсюда следует, что получить точную оценку математического ожидания невозмож- но. Естественно возникает вопрос о величине допускаемой ошибки. Ограничимся отысканием лишь верхней границы δ до- пускаемой ошибки с заданной вероятностью (надежностью) γ:

$$P(X \;\square a \;\square\square)\square\square\square. \qquad (2)$$

Интересующая нас верхняя грань ошибки δ есть «точность оценки» математического ожидания по выборочной средней при помощи доверительных интервалов. Рассмотрим следующие три случая.

1. Случайная величина X распределена нормально и ее среднее квадратичное отклонение δ известно. В этом случае с надежностью □□верхняя граница ошибки

$$\delta = \frac{t \cdot \sigma}{\sqrt{n}}, \qquad (3)$$

где n — число испытаний (разыгранных значений X); t — значение аргумента функции Лапласа, при котором

$\Phi(t) = \frac{\gamma}{2}$, σ — известное среднее квадратичное отклонение

X.

2. Случайная величина X распределена нормально, причем ее среднее квадратическое отклонение σ неизвестно. В этом случае с надежностью γ верхняя граница ошибки

$$\delta = \frac{t_\gamma \cdot s}{\sqrt{n}}, \qquad (4)$$

где

n — число испытаний;

s — «исправленное» среднее квадра- тическое отклонение,

t_γ - находят по табличным значениям.

3. Случайная величина X распределена по закону, отличному от нормального. В этом случае при достаточно большом числе испытаний (n > 30) с надежностью, приближенно равной γ, верхняя граница ошибки может быть вычислена по формуле (3), если среднее квадратическое отклонение σ случайной величины X известно; если же □□неизвестно, то можно подставить в формулу (3) его оценку s — «исправленное» среднее квадратическое отклонение либо воспользоваться формулой (4). За- метим, что чем больше n, тем меньше различие между результатами, которые дают обе формулы. Это объясняется тем, что при $n \to \infty$ распределение Стьюдента стремится к нормальному. Из изложенного следует, что метод Монте–Карло тесно связан с задачами теории вероятностей, математической статистики и вычислительной математики. В связи с задачей моделирования случайных величин (в особенности равномерно распределенных) существенную роль играют также методы теории чисел.

Среди других вычислительных методов метод Монте–Карло выделяется своей простотой и общностью. Медленная сходимость является существенным недостатком метода, однако, могут быть указаны его модификации, которые обеспечивают высокий порядок сходимости при определенных предположе ниях. Правда, вычислительная процедура при этом усложняется и приближается по своей сложности к другим процедурам вычислительной математики. Сходимость метода Монте–Карло является сходимостью по вероятности. Это обстоятельство вряд ли следует относить к числу его недостатков, ибо вероятностные методы в достаточной мере оправдывают себя в практических приложениях. Что же касается задач, имеющих вероятностное описание, то сходимость по вероятности является даже в какой-то мере естественной при их исследовании.

Применение метода Монте–Карло к моделированию физических процессов

Суть решения физических задач методом Монте–Карло заключается в том, что физическому явлению сопоставляется имитирующий вероятностный процесс, отражающий его динамику (другими словами, каждому элементарному акту процесса сопоставляется некоторая вероятность его осуществления). Затем этот процесс реализуется с помощью набора случайных чисел. Интересующие нас значения физических величин находятся усреднением по множеству реализаций моделируемого процесса.

Основным преимуществом метода Монте–Карло по сравнению с классическими численными методами состоит в том, что с его помощью можно исследовать физические явления практически любой сложности, которые иначе решить просто невозможно. Например, решить уравнения, описывающие взаимодействие двух атомов, будет сравнительно несложно, однако решить такую же задачу для сотни атомов уже не реально. Кроме того, для метода Монте–Карло часто характерна простая структура вычислительного алгоритма. Как правило, составля- ется программа для осуществления одного случайного испытания (шага модели). Затем это испытание повторяется необходимое число раз, причем каждый последующий шаг не зависит от всех остальных.

Метод Монте–Карло можно также назвать «теоретическим экспериментом». Действительно, если точно известны законы элементарных актов, а вместе с ними и вероятности элементарных событий, результаты, получаемые этим методом, были бы подобны экспериментальным данным.

1.5. Примеры математических моделей физике, химии, биологии

1.5.1. Модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы, твердого и деформируемого тела

Можно привести много примеров, когда моделирование помогло не только объяснить какие-либо явления в природе, технике или физике, но и предсказать или сделать новые открытия в тех областях человеческой деятельности, без которых сейчас цивилизация вряд ли может обойтись. Достаточно упомянуть значение для современной деятельности электротехники и электроники, машиностроения и приборостроения, получения, передачи и сохранения энергии. В естественных науках наиболее распространены физические и математические модели. Нет никаких сомнений в том, что процесс математи- зации, развитие и применение математических моделей и математического аппарата будут в ближайшие годы еще более усиливаться. Этим объясняется возросший за последние годы интерес к вопросам использования математики: как создаются математические модели, как они изучаются, как интерпретируются и так далее.

Рассмотрим примеры математических моделей в различных областях, в частности, в физике . Одной из первых линейных моделей является всем хорошо известный закон Гука:

$$F = -kx, \tag{5}$$

где F — сила упругости; x — удлинение (деформация) тела; k — коэффициент пропорциональности, зависящий от размеров и материала тела, называемый жесткостью.

Обнаружение линейной зависимости при достаточно малых деформациях между последними и напряжениями в металлах позволило сделать множество открытий в физике и технике, а также открыло возможность для механиков-испытателей про- двигаться вперед, развивая линейную теорию упругости, а вслед за ней и математический аппарат, пригодный для построения моделей многих других явлений и процессов.

Еще более сложными моделями являются уравнения мате матической физики — дифференциальные уравнения в частных производных, которые описывают процессы в пространстве и времени. Уравнение в частных производных в трехмерном пространстве впервые ввел Пьер Симон Лаплас:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=0. \qquad (6)$$

Уравнения в частных производных используются для описания таких физических явлений, как теплопроводность, колебания струны, распространения линейных волн различной физической природы и др.

Еще одним хорошим примером математических моделей в физике являются уравнения электромагнитного поля Мак- свелла.

$$\nabla\cdot D=p,\ \ \nabla\times E=-\frac{dB}{dt},\ \ \nabla\cdot B=0,\ \ \nabla\times H=j+\frac{dD}{dt}, \qquad (7)$$

где E — вектор напряженности электрического поля, D — век- тор электрической индукции, B — вектор магнитной индук- ции, H — вектор напряженности магнитного поля, p — плот- ность заряда, j — ток смещения.

Уравнения Максвелла позволили предсказать существование электромагнитных волн и определить, что свет есть не что иное, как электромагнитная волна. Используя теорию Максвелла, Лоренц свою работу «Преобразования» применил к движущимся телам. Данная работа стала предпосылкой создания теории относительности. Трактат Максвелла об электричестве и магнетизме открыл новые возможности физики.

Сюда можно отнести и фундаментальное уравнение волновой и квантовой механики, открытое австрийским физиком Эрвином Шредингером, которое описывает движение частицы в заданном потенциальном поле (формула (8)).

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+U\Psi, \qquad (8)$$

где Ψ — волновая функция, U — потенциальная энергия.

Уравнение Шредингера играет в квантовой теории такую же роль, как основное уравнение динамики в классической механике. Данное уравнение было именно найдено, оно описывает новые фундаментальные закономерности, которые невозможно вывести из прежних классических представлений и теорий. Справедливость его установления в том, что все вытекающие из него следствия и решения подтверждены экспериментально.

Данный список можно продолжать и дальше, есть законы Ньютона, преобразования Лоренца и т.д. Рассмотрим некоторые уравнения математической физики, используемые для описания физических процессов, более подробно.

Уравнения баланса

Описание закономерностей изучаемых явлений строится на основе аналитических выражений относительно характеристических параметров, отражающих их свойства. Эти параметры делятся на экстенсивные, зависящие от массы системы или количества частиц в системе, и интенсивные, не связанные с ней. К первым относятся: масса, импульс, энергия. Величина параметров данной системы изменяется в соответствии с законами сохранения, определяющими фундаментальные свойства пространства, времени и материи. Аналитические формы законов сохранения формулируются в виде соответствующих уравнений баланса. Представителями второго типа являются: давление, температура, напряжение и т.д.

В большинстве случаев соответствующие аналитические вы- ражения уравнений баланса для сплошной среды могут быть представлены в двух формах [8]:

- □ в виде локального баланса для выделенной в пространстве неподвижной области:

$$\frac{\partial}{\partial t}(pa)+div\Gamma_A^0=\omega_A^0, \tag{9}$$

где A — произвольная экстенсивная характеристика, a — соответствующая ей удельная величина в точке физического пространства, p — объемная плотность массы вещества, I_A — вектор плотности тока величины A, □$_A$ — плотность производства A внутри объема;

- в материальной форме, т.е. в виде баланса для движущегося в пространстве произвольного объема сплошной среды:

$$p\frac{\partial a}{\partial t}+divI_A=\omega_A. \tag{10}$$

Примерами уравнений баланса являются законы сохранения импульса, энергии, массы и др.

Закон сохранения импульса. Рассмотрим первый из них в классической формулировке, который утверждает, что изменение количества движения любого индивидуального объема материального континуума равно импульсу внешних сил, действующих на этот индивидуальный объем. В аналитической форме его можно записать в виде

$$\frac{dv}{p}$$

$$dt \sum_k Fk \qquad (11)$$

где p — объемная плотность массы среды; v — скорость среды; Fk — внешние силы (отнесенные к единице объема), действующие на индивидуальный объем сплошной среды

1.5.2. Модели эволюции и развития в биологии, модели распределения биологических систем

Чем более сложными являются объекты и процессы, которыми занимается наука, тем труднее найти математические абстракции, подходящие для описания этих объектов и процессов. В биологию, геологию и другие «описательные науки» математика пришла по настоящему только во второй половине XX века. Первые попытки математически описать биологические процессы относятся к моделям популяционной динамики. Эта область математической биологии и в дальнейшем служила математическим полигоном, на котором «отрабатывались» математические модели в разных областях биологии, в том числе модели эволюции, микробиологии, иммунологии и других областей, связанных с клеточными популяциями.

Простейшие модели в биологии

Самая первая известная модель, сформулированная в биологической постановке,— это знаменитый ряд Фибоначчи, который приводит в своем труде Леонардо из Пизы в XIII веке. Это ряд чисел, описывающий количество пар кроликов, которые рождаются каждый месяц, если кролики начинают размножаться со второго месяца и каждый месяц дают потомство в виде пары кроликов. Ряд представляет последовательность чисел: 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233 ...

Если описать этот ряд математически, то каждый последующий член данного ряда равен сумме двух предыдущих, начиная с третьего члена.

Следующая известная в истории модель — модель Мальтуса (1778 г.), описывающая размножение популяции со скоростью, пропорциональной ее численности. В дискретном виде этот закон представляет собой геометрическую прогрессию, которая в виде дифференциального уравнения представляет собой модель экспоненциального роста популяции и хорошо описывает рост клеточных популяций в отсутствие какого-либо лимитирования.

На этих простейших моделях видно, насколько примитивны математические модели по сравнению с биологическими объектами. Так, популяция — это совокупность сложно организованных индивидуальных особей организмов. В свою очередь каждый организм состоит из органов, тканей и клеток, осуществляет процессы метаболизма, двигается, рождается, растет, размножается, стареет и умирает. И каждая живая клетка — сложная гетерогенная система, объем которой разграничен мембранами и содержит субклеточные органеллы, и так далее, вплоть до биомакромолекул, аминокислот и полипептидов. Ясно, что для таких систем любая математика дает лишь грубое упрощенное описание.

Модели в биологии применяются для моделирования биологических структур, функций и процессов на разных уровнях организации живого: молекулярном, субклеточном, клеточном, органно-системном, организменном и популяционно-биоценотическом. Возможно также моделирование различных био- логических феноменов, а также условий жизнедеятельности отдельных особей, популяций и экосистем.

Виды моделей в биологии

В биологии применяются в основном модели трех видов:

1. *Биологические*. В нашем курсе мы их не рассматриваем.

2. *Физико-химические.* Физико-химические модели воспроизводят физическими или химическими средствами

биологические структуры, функции или процессы. Начиная с 60-х гг. XIX в. Были сделаны попытки создания физико-химической модели структуры и некоторых функций клеток. Так, немецкий ученый Траубе в 1867 г. имитировал рост живой клетки, а фран- цузский физик С. Ледюк в 1907 г. получил структуры, внешне напоминающие водоросли и грибы. Позднее более сложные модели строились на принципах электротехники и электроники. Например, на основе данных электрофизиологических исследований были построены электронные схемы, моделирующие биоэлектрические потенциалы в нервной клетке, ее отростке и в синапсе. Успехи также были достигнуты в моде- лировании физико-химических условий существования живых организмов или их органов и клеток: подобраны растворы неорганических и органических веществ (растворы Рингера, Локка, Тироде и др.), имитирующие внутреннюю среду организма и поддерживающие существование изолированных органов или культивируемых вне организма клеток. Модели биологических мембран позволяют исследовать физико-химические основы процессов транспорта ионов и влияние на него различных факторов. С помощью химических реакций, протекающих в растворах в автоколебательном режиме, моделируют колебательные процессы, характерные для многих биологических феноменов,— дифференцировки, морфогенеза, явлений в сложных нейронных сетях и т.д.

3. *Математические* (логико-математические). Математические модели строятся на основе данных эксперимента или умозрительно, формализованно описывают гипотезу или теорию биологического феномена и требуют дальнейшей опытной проверки. «Проигрывание» математической модели биологического явления на ЭВМ часто позволяет предвидеть характер изменения исследуемого биологического процесса в условиях, трудно воспроизводимых в эксперименте. Математическая мо дель в отдельных случаях позволяет предсказать некоторые

явления, ранее не известные исследователю. Например, модель сердечной деятельности, предложенная голландскими учеными Ван дер Полом и Ван дер Марком, основанная на теории релаксационных колебаний, указала на возможность особого нарушения сердечного ритма, впоследствии обнаруженного у человека. К математическим моделям физиологических явлений относят модели возбуждения нервного волокна, разработанные английскими учеными А. Ходжкин и А. Хаксли. На основе теории нервных сетей американских ученых У. Мак- Каллока и У. Питса строятся логико-математические модели взаимодействия нейронов. Системы дифференциальных и интегральных уравнений положены в основу моделирования био- ценозов (В. Вольтерра, А.Н. Колмогоров).

Модель «хищник–жертва»

Математическая модель наиболее простой, т.е. двухвидовой системы «хищник-жертва», основывается на следующих предположениях :

1) численности популяций жертв N и хищников M зависят только от времени;

2) 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:

$$\frac{dN}{dt}=\alpha N,\quad \frac{dM}{dt}=-\beta M,\quad \alpha>0,\ \beta>0, \qquad (23)$$

где α и β — коэффициенты рождаемости и смертности;

3) естественная смертность жертвы и естественная рождаемость хищника считаются несущественными;

4) эффект насыщения численности обеих популяций не учитывается;

5) скорость роста численности жертвы уменьшается пропорционально численности хищников cM, $c>0$, а темп роста хищников увеличивается пропорционально

численности жертвы dN.

Учитывая указанные выше предположения, получаем систему *уравнений* Лотки–Вольтерра

$$\frac{dN}{dt}=(\alpha-cM)N, \tag{24а}$$

$$\frac{dM}{dt}=(-\beta+dN)M. \tag{24б}$$

Численности популяций жертвы и хищника совершают периодические колебания вокруг положения равновесия. Амплитуда колебаний и их период определяются начальными значениями численностей $N(0)$,

M (0). Колебания, сущность которых вполне понятна (и они реально наблюдаются в природе), означают возникновение в двухвидовых популяционных системах значительно более сложных процессов, чем в одновидовых системах.

Более точные математические описания двухвидовых взаи- модействий учитывают неравномерность распределения численности популяций на занимаемых территориях (им соответствуют системы уравнений в частных производных), временное запаздывание между рождением особей и их зрелостью и т.д. Возникают гораздо более сложные картины взаимодействия как по времени, так и в пространстве.

Общие модели эволюции. Методы теоретической популяци онной генетики. Теория нейтральности М. Кимуры

1. Классическая популяционная генетика.

Синтетическая теория эволюции была развита в начале XX века. Она основана на учении Ч. Дарвина о естественном отборе и на представлениях Г. Менделя о генах, т.е. дискретных элементах передачи наследственных признаков. Большую роль в становлении синтетической теории эволюции сыграла маленькая плодовая мушка Drosophila. Именно эксперименты на этой мушке позволили примирить кажущиеся противоречия между Дарвиновским представлением о постепенном накоплении полезных изменений и наследовании этих изменений и дискретным характером Менделеевской генетики. Эксперименты на дрозофиле показали, что мутационные измене- ния могут быть очень небольшими.

Математические модели синтетической теории эволюции были разработаны Р. Фишером, Дж. Холдейном и С. Райтом. В основном эта математическая теория классической популя- ционной генетики была завершена к началу 30-х гг. XX в. Согласно синтетической теории эволюции основным механизмом прогрессивной эволюции является отбор организмов, которые получают выгодные мутации. Математические модели популяционной генетики количественно характеризуют динамику распределения частот генов в эволюционирующей популяции. Есть два основных типа моделей:

 Детерминистические модели. Детерминистические моде- ли предполагают, что численность популяции бесконеч- но велика. В этом случае флуктуациями в распределении частот генов можно пренебречь и динамику популяции можно описать в терминах средних частот генов.

 Стохастические модели. Стохастические модели описывают вероятностные процессы в популяциях конечной численности.

2. Молекулярная эволюция: теория нейтральности.

В 1950–1960-х годах произошла революция в молекулярной биологии. Была определена структура ДНК, расшифрован генетический код, ученые установили общие принципы работы молекулярно-генетической системы живой клетки. Анализируя экспериментальные данные, М. Кимура обнаружил, что когда он пытался объяснить эти эксперименты на основе селекции благоприятных мутаций путем Дарвиновского отбора, то возникли серьезные затруднения. Основное предположение этой теории состоит в следующем: на молекулярном уровне мутации преимущественно нейтральны или не опасны. Это предположение согласуется с экспериментально наблюдаемой скоростью аминокислотных замен и с тем фактом, что скорость замен в менее важных частях белков значительно больше, чем для активных центров макромолекул. Используя математические методы популяционной генетики, Кимура получил ряд следствий теории, которые находятся в довольно хорошем согласии с данными молекулярной генетики.

Математические модели теории нейтральности существенно стохастические, т.е. относительно малая численность популяции играет важную роль в фиксации нейтральных мутаций. Согласно теории Кимуры, дупликация генных участков создает дополнительные, избыточные ДНК-последовательности, которые в свою очередь дрейфуют далее за счет случайных мутаций, предоставляя тем самым сырой материал, из которого могут возникать новые, биологически значимые гены.

Теория нейтральности — одна из наиболее разработанных общих теорий эволюции. Однако есть ряд моделей и концепций, также характеризующих эволюцию на молекулярном уровне, которые в основном дополняют теорию нейтральности. Отметим наиболее известные из них:

□□ Модель Д.С. Чернавского и Н.М. Чернавской, где сдела- на оценка вероятности случайного формирования нового биологически значимого белка.

□□ Модель блочно-иерархического эволюционного отбора, согласно которой новые генетические тексты большой длины сначала случайно составляются из коротких текстов, оптимизированных в предыдущие эволюционные эпохи, а после составления оптимизируются.

□□ Блочно-модульный принцип организации и эволюции молекулярно-генетических систем управления обосновывается В.А. Ратнером. Согласно нему эволюция генов, РНК, белков, геномов и молекулярных систем управления на их основе шла путем комбинирования блоков (модулей) снизу доверху.

□□ Модель «генов-мутаторов», которая предполагает, что уровень мутаций может меняться и наследоваться.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ

1. Перечислите основные этапы процесса построения математической модели.
2. Дайте определения концептуальной и математической постановкам задачи.
3. С какой целью применяется проверка адекватности модели?
4. Опишите два принципа построения модели.
5. Какие подходы к построению математической модели вам известны? В чем они заключаются?
6. Сформулируйте составляющие погрешности при использовании численных методов.
7. Дайте определение корректности математической модели.
8. Перечислите основные этапы цикла вычислительного эксперимента.
9. Что составляет основу вычислительного эксперимента?
10. В чем отличие и сходство лабораторного и вычислительного эксперимента?
11. Каким требованиям должен соответствовать вычислительный алгоритм?
12. Назовите этапы создания программы для расчетов.
13. Перечислите преимущества вычислительного эксперимента.
14. В каких областях применяется вычислительный эксперимент?
15. Что такое имитационное моделирование?
16. Какие можно выделить виды имитационного моделирования?
17. В каких областях применяется имитационное моделирование?
18. В чем заключается метод статистического моделирования?
19. Расскажите суть метода Монте–Карло.
20. В чем преимущества и недостатки метода Монте–

Карло?

21. Что такое псевдослучайные числа?

22. Приведите несколько примеров математических моделей для описания физических процессов.

23. Какие математические методы применяются в химии?

24. Назовите простейшие математические модели в биологии.

25. Какие модели эволюции вы знаете?

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА.

1. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование.– М. Физматлит. 2005.

2. Музафаров Х.А., Баклушин М.Б., Абдураимов М.Г. Математическое моделирование. Ташкент, Университет. 2002 г.

3. Зарубин В.С. Математическое моделирование в технике: учеб. пособие для студ вузов/ Зарубин В.С.-2-е изд..- Москва.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2003. -496 с.

4. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. – М., УРСС, 2003.

5. Введение в математическое моделирование. Под.ред. В.П.Трусова. – М.Логос. 2005.

6. Тарасевич, Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: Учебное пособие / Ю.Ю. Тарасевич. - М.: ЛИБРОКОМ, 2013. - 152 с.

7. Галушко, В. А. Г16 Электротехника и основы электроники : учеб.-метод. пособие для для студентов факультета ―Управление процессами перевозокǀ / В. Н. Галушко ; М-во образования Респ. Беларусь, Белорус. гос. ун-т трансп.– Гомель : БелГУТ, 2012. – 186 с

8. Арнольд В.И. Жесткие и мягкие математические модели. М.,МСНМО. 2000.

9. Бозоров Э.Х. Медицинская информатика. -Т .: «Fan va texnologiya», 2019,352 стр.

10.Х.С Далиев,Э.Х Бозоров в/б . Медицинская электроника. -Т .:, «Fan va texnologiya», 2019,400 стр.

11.Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование.–М. Физматлит. 2005.

12.Музафаров Х.А., Баклушин М.Б., Абдураимов М.Г. Математическое моделирование. Ташкент, Университет. 2002 г.

13.Марчук, Г.И. Геронтология in silico. Становление новой дисциплины. Математические модели, анализ данных и вычислительные эксперименты / Г.И. Марчук. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2017. - **581** с.

14. Математические модели в биологии. Учебное пособие / Т.Ю. Плюснина и др. - Москва: **ИЛ**, 2014. - 136 с.

Бозоров Э.Х
Кубаев А.Э

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Учебно-методическое пособие

Издательство, «Самаркандский государственный институт иностранных языков» – 2024
Адрес: 140104, г. Самарканд, ул. Бустонсарой, д. 93.

Редактор: С. Каримова
Корректор: З. Усманова
Тех.редактор: Ш. Абдурахимов

Лицензия на печать:

4268

Потверждение издательство:
№ 1243-7560-5999-432c-2125-1811-8655

Подписано в печать 12.01.2024 г.
Формат бумаги 60x84 1/16. Бумага офсетная. Объем 2,0 п.л.
Отпечатано офсетным способом. Тираж 100 экз. Заказ №12/01.

Отпечатано в типографии СамГИИЯ.
Адрес: г. Самарканд, ул. Бустонсарой, д. 93.