2 ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

2.1 Этапы построения математической модели

Построение математических моделей является достаточно трудным процессом, включающим большие затраты 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. рисунок 2.1):

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. создание 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 и эффекты. 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 математически для количественного анализа их выполнения. На этапе составления математического описания предвари-

тельно 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. Установить корректность математической задачи является сложной 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.

Рисунок 2.1 – 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 поведение 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 аналитического решения задачи численное решение практически 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 подходами. Модель необходимо отбросить или модифицировать в случае получения с ее помощью результата, существенно отличающегося от истинного. Этап установления степени соответствия 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.

2.2 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, декомпозицию сложного объекта, анализ, затем синтез. Здесь широко используется подобие, аналогичное моделированию, умозаключение с целью формирования каких-либо закономерностей в виде предположений о поведении системы. Например, подобным способом происходит моделирование строения атома.

Среди подходов к разработке математических моделей относят:

1. Фундаментальные законы природы. Данный принцип является самым распространенным и заключается в использовании фундаментальных законов природы применительно к конкретной ситуации. Как правило, законы признаны, 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 по широте и универсальности сравним с первым подходом и заключается в применении 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 связано 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 унификацию и использование набора готовых моделей. При иерархическом 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 принцип построения моделей позволяет: разбить общую задачу построения математической модели на отдельные подзадачи и тем самым упростить ее решение, а также использовать разработанные блоки в других моделях, модернизировать отдельные блоки и заменять их на новые. Общее математическое описание модели представляет собой совокупность математических описаний отдельных блоков. Применение блочного принципа построения матема-

тических моделей позволяет во многих случаях решить проблему масштабирования процессов.

Принципиально каждый блок математической модели может иметь различную степень детализации математического описания. Важно лишь, чтобы входные и выходные переменные 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 принципа в математическом описании каждого блока на том или ином уровне его детализации приходится применять эмпирические соотношения.

2.3 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 таблице 2.1 показано сравнение лабораторного и вычислительного эксперимента.

Ни одно техническое достижение не повлияло так на интеллектуальную деятельность человека, как электронно-вычислительные машины. Появление компьютеров привело к невероятным изменениям в производительности интеллектуального труда за счет роста скорости выполнения арифметических и логических операций с помощью ЭВМ. В начале XXI века появилась реальная возможность использовать их в научных исследованиях 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 несовершенных ЭВМ сложных математических задач ядерной физики, баллистики, прикладной небесной механики.

Таблица 2.1 – 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

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 особенности 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 математической моделью объекта на ЭВМ, который состоит в том, чтобы по одним параметрам модели вычислить другие ее параметры и на этой основе сделать выводы о свойствах явления, описываемого математической моделью.

Вычислительный эксперимент представляет собой циклический процесс, состоящий из следующих этапов (рисунок 2.2):

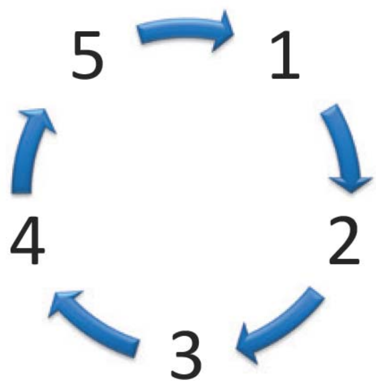

Рисунок 2.2 – Схема технологического цикла вычислительного эксперимента: 1 – построение математической модели; 2 – разработка метода расчета; 3 – программирование; 4 – расчеты на компьютере; 5 – сравнение результатов расчетов с данными опыта, уточнение моделей

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 интегро-дифференциальных 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 дискретному 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 реализации на компьютере. Создание надежного и функционального программного обеспечения (ПО) является, может быть, даже более сложным в сравнении с предыдущими этапами. Реализация на данном этапе зависит от знания современных алгоритмических языков, технологий и языков кодирования и ресурса вычислительных систем. Современное программирование является самостоятельной наукой со своими фундаментальными принципами, подходами и методами. В этой связи программный комплекс является сложной системой, содержащей языки 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» природе, 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 обеспечивается 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 выполняется всесторонний анализ результатов расчета и выводы, после которых или становится ясна необходимость уточнения модели, или результаты, пройдя проверку на разумность и надежность, передаются заказчику для исполнения.

Дополнительно можно продолжить классификацию следующими этапами:

6. Проведение натурного эксперимента для получения данных, необходимых для уточнения модели.

7. Накопление экспериментальных данных.

8. Построение математической модели.

9. Автоматическое построение программной реализации математической 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.

2.4 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.