



**Уральский  
федеральный  
университет**

имени первого Президента  
России Б.Н.Ельцина

**Физико-  
технологический  
институт**

**С. В. ЗВОНАРЕВ**

# ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Учебное пособие



Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

С. В. Звонарев

# ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Учебное пособие

Рекомендовано методическим советом  
Уральского федерального университета  
для студентов вуза, обучающихся  
по направлению подготовки  
11.03.04 — Электроника и наноэлектроника

Екатеринбург  
Издательство Уральского университета  
2019

УДК 001.891.573(075.8)

ББК 22в6я73

3-42

Рецензенты:

отдел прикладных задач Института математики и механики им. Красовского УрО РАН(ведущий научный сотрудник, д-р физ.-мат. наук *М. Ю. Филимонов*);

ведущий научный сотрудник Института химии твердого тела УрО РАН канд. физ.-мат. наук *Л. А. Акашев*

Научный редактор — д-р физ.-мат. наук, проф. *В. Г. Мазуренко*

**Звонарев, С. В.**

3-42 Основы математического моделирования: учебное пособие / С. В. Звонарев. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2019. — 112 с.

ISBN 978-5-7996-2576-4

Учебное пособие составлено на основе курса лекций «Основы математического моделирования», читаемого бакалаврам направления 11.03.04 — «Электроника и нанoeлектроника». Рассмотрены основные понятия математического моделирования. Представлены математические модели и принципы их построения. Описаны примеры математических моделей в физике, химии, биологии.

Пособие предназначено для студентов вузов, аспирантов и специалистов изучающих математического моделирование физических процессов.

Библиогр.: 28 назв. Табл. 3. Рис. 19.

УДК 001.891.573(075.8)

ББК 22в6я73

ISBN 978-5-7996-2576-4

© Уральский федеральный университет, 2019

# Оглавление

---

<b>Введение</b> .....	5
<b>1. Понятия «моделирование» и «модель»</b> .....	7
1.1. Модель.....	8
1.2. Цели построения моделей.....	9
1.3. Свойства моделей .....	10
1.4. Формы представления модели .....	12
1.5. Моделирование.....	12
1.6. Классификация моделирования .....	15
1.7. Классификация моделей .....	17
Контрольные вопросы и задания .....	21
<b>2. Математические модели и их классификации</b> .....	22
2.1. Математическая модель.....	22
2.2. Обобщенная математическая модель.....	23
2.3. Нелинейность математических моделей.....	25
2.4. Степень соответствия математической модели объекту.....	25
2.5. Классификация математических моделей .....	26
Контрольные вопросы и задания .....	37
<b>3. Построение математической модели и вычислительный эксперимент</b> .....	38
3.1. Этапы построения математической модели .....	38
3.2. Подходы к построению математических моделей .....	42
3.3. Вычислительный эксперимент.....	45
3.4. Имитационное моделирование .....	52
3.4.1. Статистическое моделирование.....	55
3.4.2. Метод Монте–Карло.....	56

3.5. Примеры математических моделей в физике, химии, биологии .....	64
3.5.1. Модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы, твердого и деформируемого тела .....	64
3.5.2. Модели в химии .....	71
3.5.3. Модели эволюции и развития в биологии, модели распределения биологических систем ...	74
Контрольные вопросы и задания .....	81
<b>4. Многомасштабное моделирование материалов и процессов .....</b>	<b>83</b>
4.1. Виды многомасштабного моделирования .....	85
4.2. Многомасштабное моделирование энергетических процессов .....	89
4.3. Моделирование в наноструктурной области .....	91
4.4. Программное обеспечение моделирования наносистем .....	100
Контрольные вопросы .....	106
<b>Список литературы .....</b>	<b>107</b>

---

## Введение

---

Различные элементы математического моделирования применялись одновременно с появлением точных наук. С данным фактом связано то, что часть из них носят имена корифеев науки, например, Ньютона и Эйлера, а слово «алгоритм» происходит от имени средневекового арабского 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. С помощью математического моделирования данная задача была решена. На первом этапе ядерные взрывы и полеты ракет моделировались посредством ЭВМ, а уже впоследствии были реализованы на практике. Данный факт способствовал дальнейшему развитию методологии моделирования, без которой в настоящее время не реализуется ни один крупномасштабный технологический, экологический или экономический проект [1].

Технические, экологические, экономические и иные системы, изучаемые современной наукой, больше не поддаются исследованию обычными теоретическими методами. Прямой натурный эксперимент над ними долгов, дорог, часто либо

опасен, либо попросту невозможен, так как многие из этих систем существуют в «единственном экземпляре». Цена ошибок и просчетов в обращении с ними недопустимо высока. Поэтому математическое моделирование является неизбежной составляющей научно-технического прогресса.

Математическое моделирование, являясь методологией, используется как инструмент в научных 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 на опыте (апостериорный), анализ адекватности используемых моделей, гарантированная точность вычислительных алгоритмов и т. д. При моделировании трудноформализуемых объектов нужно дополнительно учитывать разграничение математических и нематематических терминов, а также особенности использования существующего математического аппарата к изучению объектов.



---

## 1. Понятия «моделирование» и «модель»

---

**М**ожно выделить несколько этапов создания методологии математического моделирования:

- Появление точных наук. Методы вычислений носят имена таких корифеев науки, как Ньютон и Эйлер, а слово «алгоритм» происходит от имени средневекового арабского ученого Аль-Хорезми.
- Конец 40-х—начало 50-х годов XX века:
  - появление компьютеров;
  - разработка ядерных технологий.
- Появление информационного общества. Методология математического моделирования становится интеллектуальным ядром информационных технологий.

В раннем возрасте человек начинает взаимодействовать с различными моделями. Игра по построению конструкций из кубиков представляет собой создание некоторых моделей. При обучении распространено использование моделей в той или иной форме. Для изучения правил, например, русского языка применяются различные схемы и таблицы, которые являются моделями, отражающими свойства изучаемого объекта. Подготовку текста можно рассматривать как моделирование некоторого события или явления с помощью родного языка. На уроках точных наук также используются макеты изучаемых реальных объектов [2].

Следует заметить, что во взрослой жизни человек также постоянно сталкивается с моделями реальных объектов, процес-

сов и явлений. При этом для создания сложных изделий необходима работа коллективов разработчиков. В качестве примера можно привести большой адронный коллайдер (где планируется провести моделирование Большого взрыва, после которого, согласно гипотезе, возникла наша Вселенная) и всем известный фильм «Титаник», где для сцен гибели корабля было использовано более десяти моделей судна.

Инструментом математического моделирования в первую очередь является математика. В настоящее время математическое моделирование применяется в:

- традиционных областях — физика, химия, биология;
- новых областях и дисциплинах — технические, экологические и экономические системы. Сложности:
  - прямой натурный эксперимент либо опасен, либо невозможен;
  - система существует в единственном экземпляре;
- социальных процессах.

## 1.1. Модель

---

Что такое модель? Модель от лат. *modulus* — мера, мерило, образец, норма). Под моделью можно понимать:

- образец, служащий эталоном (стандартом) для серийного или массового воспроизведения (модель автомобиля, модель одежды и т. п.), а также тип, марка какого-либо изделия, конструкции;
- изделие (изготовленное из дерева, глины, воска, гипса и др.), с которого снимается форма для воспроизведения в другом материале (металле, гипсе и др.);
- человека, позирующего художнику (натурщик), и вообще изображаемые объекты («натура»);

- устройство, воспроизводящее, имитирующее (обычно в уменьшенном масштабе) строение и действие какого—либо другого устройства в научных, практических (например, в производственных испытаниях) или спортивных целях.

Перед тем как запустить в производство новый самолет, его обкатывают в аэродинамической трубе — это модель. Для того чтобы продемонстрировать систему кровообращения, лектор обращается к нарисованному плакату — это модель. На стене висит картина Айвазовского «Девятый вал» — это модель.

Под моделью обычно понимают материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания замещает объект — оригинал, сохраняя некоторые важные его черты. Каждый изучаемый процесс можно описать различными моделями, при этом ни одна модель не может сделать это абсолютно полно и всесторонне. Однако использование упрощенной модели, отражающей отдельные черты исследуемого объекта, позволяет яснее увидеть взаимосвязь причин и следствий, входов и выходов, быстрее сделать необходимые выводы, принять правильные решения [3].

## 1.2. Цели построения моделей

---

Реальный объект в сравнении с моделью сложен для анализа и менее информативен. Необходимо заметить, что исследование непосредственным образом большинства объектов и явлений невозможно. Так, эксперименты с экономикой страны или со здоровьем ее населения в принципе невозможны.

Среди целей моделирования можно выделить следующие [2]:

- понять, как устроен конкретный объект: какова его структура, внутренние связи, основные свойства, законы раз-

вития, саморазвития и взаимодействия с окружающим миром;

- научиться управлять объектом или процессом, определить наилучшие способы управления при заданных целях и критериях;
- прогнозировать прямые и косвенные последствия реализации заданных способов и форм воздействий на объект.

Модель может быть представлена различными способами. В широком смысле *модель* определяют как отражение наиболее существенных свойств объекта.

### 1.3. Свойства моделей

---

Основными требованиями, предъявляемыми к математическим моделям, являются требования адекватности, универсальности и экономичности (рис. 1).

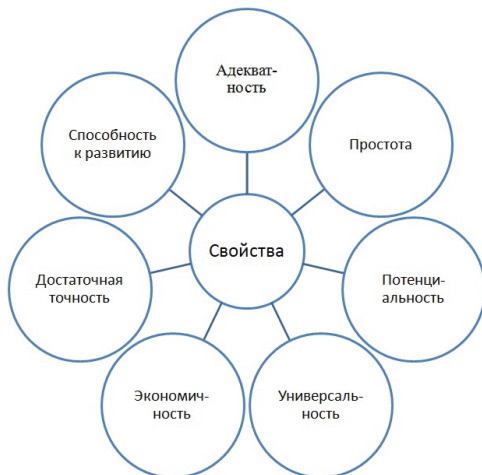


Рис. 1. Свойства моделей

*Адекватность.* Модель считается адекватной, если отражает заданные свойства с приемлемой точностью. Точность определяется как степень совпадения значений выходных параметров модели и объекта. Точность модели различна в разных условиях функционирования объекта. Эти условия характеризуются внешними параметрами. В пространстве внешних параметров выделить область адекватности модели, где погрешность меньше заданной предельно допустимой погрешности. Определение области адекватности моделей — сложная процедура, требующая больших вычислительных затрат, которые быстро растут с увеличением размерности пространства внешних параметров. Эта задача по объему может значительно превосходить задачу параметрической оптимизации самой модели, поэтому для вновь проектируемых объектов может не решаться.

*Универсальность.* Определяется в основном числом и составом учитываемых в модели внешних и выходных параметров.

*Экономичность.* Модель характеризуется затратами вычислительных ресурсов для ее реализации — затратами машинного времени и памяти.

*Простота.* Модель, при которой желаемый результат достигается за то же время с той же точностью при учете меньшего количества факторов при расчете, называется простой.

*Потенциальность (предсказательность).* Возможность получения новых знаний об исследуемом объекте с помощью применения модели.

*Достаточная точность результатов* решения задачи, надежность функционирования модели.

*Способность к совершенствованию* модели без ее коренной переделки.

*Простота* форм исходных данных и их заполнения при выдании задания на расчет.

С помощью разрабатываемой модели решается широкий круг задач.

Противоречивость требований к модели обладать широкой областью адекватности, высокой степенью универсальности и высокой экономичностью обуславливает использование ряда моделей для объектов одного и того же типа.

#### 1.4. Формы представления модели

---

Среди форм представления моделей можно выделить следующие [4]:

- инвариантная — запись соотношений модели с помощью традиционного математического языка безотносительно к методу решения уравнений модели;
- аналитическая — запись модели в виде результата аналитического решения исходных уравнений модели;
- алгоритмическая — запись соотношений модели и выбранного численного метода решения в форме алгоритма;
- схемная (графическая) — представление модели на некотором графическом языке (например, язык графов, эквивалентные схемы, диаграммы и т. п.);
- физическая — представление моделей как уменьшенных копий реальных аппаратов и технологических процессов;
- аналоговая — модели, основанные на подобию явлений, имеющих различную физическую природу, но описываемых одинаковыми математическими уравнениями.

#### 1.5. Моделирование

---

По мере того как какая-либо наука становится более точной, в ней во все больших масштабах применяется математическое описание исследуемых объектов и явлений. В частности,

данный принцип давно утвердился во многих областях физики. Однако это не всегда находит понимание среди специалистов в области нанотехнологии из-за отсутствия опыта по математическому моделированию наносистем.

Чтобы избежать бесполезного конструирования и сборки многочисленных дорогих прототипов наносистем, нужно сначала детально разработать структуру и технологию сборки нанообъекта или молекулярного кластера. Для этих целей используют методы компьютерного моделирования. С помощью моделирования, основанного на большом количестве экспериментальной информации, можно описать поведение проектируемых наносистем. Кроме того, компьютерное моделирование в ряде случаев является катализатором для экспериментальных исследований и производства. В последнее время расширяется круг задач, при решении которых применяется компьютерное моделирование. Если в прошлом моделирование, в частности компьютерное, было направлено на количественное описание процессов в материалах, то в настоящее время большое внимание уделяется созданию новых перспективных материалов и прогнозированию их свойств [5].

Рассматривая элементарную картину общего метода познания мира (см. рис. 2), можно идентифицировать реальный и умозрительный мир. В реальном мире наблюдают различные явления и процессы, происходящие как в природной, так и в техногенной среде. Умозрительный мир — это мир ума, описывающий представление людей о реальном мире с помощью наблюдения, моделирования и предсказания.

При моделировании используются модели трех типов:

- описывающие поведение объектов или результаты наблюдений за явлениями;
- объясняющие причину такого поведения и получение таких результатов;
- позволяющие предсказать поведение и результаты в будущем.

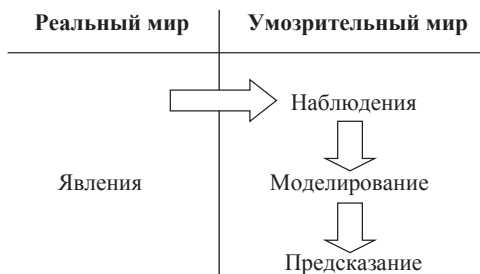


Рис. 2. Элементарное описание общего метода познания [5]

Моделирование является одним из методов познания, изучением которых занимается специальная область знаний — методология.

*Моделирование* — это особый метод познания окружающего мира, который относится к общенаучным методам. Он может применяться как на эмпирическом, так и на теоретическом уровнях. В английском языке для понятия моделирования существует два термина: *modeling* и *simulation*. Первый означает моделирование, основанное главным образом на теоретических положениях, а второй — воспроизведение, имитацию состояния системы на основе анализа ее поведения (имитационное моделирование) [5].

**Понятие моделирования** по А. А. Ляпунову [6] определяется как опосредованное практическое или теоретическое исследование объекта, при котором непосредственно изучается не сам интересующий нас объект, а некоторая вспомогательная искусственная или естественная система (модель):

- находящаяся в некотором объективном соответствии с познаваемым объектом;
- способная замещать его в определенных отношениях;
- дающая при ее исследовании, в конечном счете, информацию о самом моделируемом объекте.

Моделирование не является расширением теории или эксперимента — его следует рассматривать как отдельную пози-



цию между теорией и экспериментом. Более того, моделирование является новым видом получения научных знаний с некоторыми общими чертами, заимствованными из теории и эксперимента.

## 1.6. Классификация моделирования

Большое количество типов моделирования и их постоянное изменение не позволяют создать логически законченную классификацию. В настоящее время моделирование можно условно разделить на *материальное*, или *физическое* моделирование, и *идеальное* моделирование (см. рис. 3).

*Материальным (физическим) моделированием* принято называть моделирование, при котором реальному объекту противопоставляется увеличенная или уменьшенная копия, изученные свойства которой переносятся на объект при помощи теории подобия. При материальном моделировании исследование объекта происходит при его воспроизведении в ином масштабе. Здесь возможен количественный перенос результатов эксперимента с модели на оригинал. Однако для анализа сложных объектов и процессов, каковыми являются большинство электронных схем, конструкций и технологических процессов производства радиоэлектронной техники, приборостроения, машиностроения и других промышленных отраслей, применение материального моделирования затруднительно, поскольку приходится использовать большое число критериев и ограничений, которые могут быть несовместимы, а зачастую и невыполнимы. Примерами материального моделирования являются макеты в архитектуре и макеты моделей и экспериментальных образцов при создании различных транспортных и летательных средств (аэродинамическая труба).

Реальность	
Идеальное моделирование	Материальное моделирование

Рис. 3. Виды моделирования

*Идеальным моделированием* называется моделирование, при котором реальному объекту противопоставляется описание его в форме речи, графики, таблиц, математических выражений. Главное отличие идеального моделирования от материального в том, что оно основано не на материализованной аналогии объекта и модели, а на аналогии идеальной, мыслимой и всегда носит теоретический характер.

Натурное и аналоговое моделирование являются составляющими материального моделирования (рис. 4).

Материальное моделирование	
Натурное моделирование	Аналоговое моделирование

Рис. 4. Виды материального моделирования

*Натурное моделирование* — моделирование, при котором реальному объекту ставится в соответствие его увеличенный или уменьшенный материальный аналог, допускающий исследование с помощью последующего перенесения свойств изучаемых процессов и явлений с модели на объект на основе теории подобия. В качестве примера натурного моделирования можно привести испытание нового автомобиля или самолета в аэродинамической трубе.

*Аналоговое моделирование* — моделирование, основанное на аналогии процессов и явлений, имеющих различную физическую природу, но одинаково описываемых формально.

Идеальное моделирование можно разделить на следующие типы: интуитивное, знаковое и научное (рис. 5).

Идеальное моделирование		
Интуитивное моделирование	Научное моделирование	Знаковое моделирование

Рис. 5. Виды идеального моделирования

*Интуитивное моделирование* — моделирование, основанное на интуитивном представлении об объекте исследования, не поддающемся формализации или не нуждающемся в ней.

*Научное моделирование* — всегда логически обоснованное моделирование, использующее минимальное число предположений, принятых в качестве гипотез на основании наблюдений за объектом моделирования.

К примеру интуитивной модели можно отнести жизненный опыт человека по лечению заболеваний с помощью методов народной медицины.

*Знаковое моделирование* — моделирование, использующее в качестве моделей знаковые изображения какого-либо вида: схемы, графики и т. д.

Примером знакового моделирования являются ноты музыкальных произведений, химические формулы и т. д.

## 1.7. Классификация моделей

Можно привести следующую классификацию моделей (см. рис. 6) [2]. При анализе поведения объекта-оригинала формируется мысленный его образ или идеальная модель, называемая когнитивной.

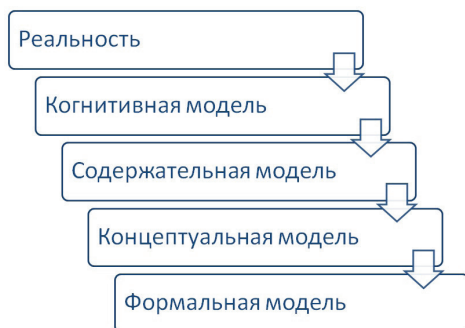


Рис. 6. Взаимовлияние уровней моделирования

Представление когнитивной модели на естественном языке называют *содержательной моделью*. В зависимости от целей модели классифицируются на описательные, объяснительные и прогностические [2].

*Описательной моделью* можно назвать любое описание объекта.

*Объяснительная модель* должна обеспечить объяснение причин нахождения системы в текущем состоянии.

*Прогностическая модель* должна обеспечивать понимание поведения объекта в будущем.

*Концептуальной моделью* принято называть содержательную модель, при формулировке которой используются понятия и представления предметных областей знания, занимающихся изучением объекта моделирования.

Выделяют три вида концептуальных моделей: логико-семантические, структурно-функциональные и причинно-следственные.

*Логико-семантическая модель* — модель с описанием объекта в терминах и определениях соответствующих предметных областей.

*Структурно-функциональная модель* — модель рассмотрения объекта как единого целого, с последующим изучением его отдельных элементов или подсистем.

---

*Причинно-следственная модель* — модель, применяемая для объяснения и прогнозирования поведения объекта.

*Формальная модель* является представлением концептуальной модели с помощью одного или нескольких формальных языков.

*Информационная модель* — модель, содержащая автоматизированные справочники, реализованные с помощью систем управления базами данных.

Формальная классификация моделей основывается на классификации используемых математических средств [7]. Часто строится в форме дихотомий (разделение на две части). Например, один из популярных наборов дихотомий:

- линейные или нелинейные модели;
- сосредоточенные или распределенные системы;
- детерминированные или стохастические;
- статические или динамические;
- дискретные или непрерывные и т. д.

Каждая построенная модель является линейной или нелинейной, детерминированной или стохастической. Естественно, что возможны и смешанные типы: в одном отношении сосредоточенные (по части параметров), в другом — распределенные модели и т. д.

*Классификация по способу представления объекта.*

Наряду с формальной классификацией, модели различаются по способу представления объекта:

- структурные;
- функциональные.

*Структурные модели* представляют объект как систему со своим устройством и механизмом функционирования.

*Функциональные модели* не используют таких представлений и отражают только внешне воспринимаемое поведение (функционирование) объекта. В их предельном выражении они называются также моделями «черного ящика». Возможны также комбинированные типы моделей, которые иногда называют моделями «серого ящика».

Модели, замещающие технологический объект, в зависимости от типа образа разделяют на три вида: абстрактные, аналоговые и физические.

*Абстрактные* модели основываются на возможности описания технического объекта (системы) на языке символов, принятом в той или иной области науки путем отвлечения от несуществующих признаков. Абстрактные модели могут быть математическими и нематематическими. Процесс исследования технического объекта с помощью абстрактной модели включает три этапа:

- построение описательной модели процесса, которая должна отвечать на вопросы «что происходит», «почему так происходит», «при каких условиях это возможно», «что может произойти при изменении данных параметров и внешних условий»;
- запись информативной модели с помощью определенной системы символов;
- исследование функционирования созданной абстрактной модели различными методами анализа, большинство из которых опирается на математический анализ.

*Аналоговые* модели основаны на подобии явлений, имеющих различную физическую природу, но описываемых одинаковыми математическими уравнениями. Подобие математического описания этих процессов позволяет экспериментально и теоретически подтверждать результаты, полученные в одной области, соответствующими результатами из другой. Примерами аналоговых моделей могут служить электрические и механические колебания.

*Физические* модели имеют ту же физическую природу, что и исследуемый объект, и применяются в тех случаях, когда трудно провести испытания реальных объектов в реальных условиях. В химической технологии применяют физические модели — уменьшенные копии реальных аппаратов и технологических процессов (различают лабораторные установки и так называ-

емые пилотные). При использовании результатов необходимо учитывать эффект масштабирования.

## Контрольные вопросы и задания

---

1. Что такое модель и моделирование?
2. Назовите цели моделирования.
3. Какие существуют виды моделирования?
4. Перечислите свойства моделей.
5. Какие формы представления моделей вам известны?
6. Назовите отличие идеального моделирования от материального.
7. Что такое когнитивная модель?
8. Какие модели называют содержательными?
9. Назовите разновидности содержательных моделей.
10. Чем концептуальная модель отличается от содержательной?
11. Какие виды концептуальных моделей вы знаете?
12. По каким классификационным признакам можно подразделять модели?
13. Какие модели в зависимости от способа представления объекта вы знаете?

---

## 2. Математические модели и их классификации

---

### 2.1. Математическая модель

---

**П**онятие «математическое моделирование» в последние несколько десятилетий является достаточно распространенным в научной литературе, в частности, в естественнонаучной и технической. В настоящее время практически на любом проектном или конструкторском предприятии применяются математические модели. В последние годы широкое распространение получило применение математического моделирования в научных исследованиях, особенно в таких областях, как экономика, управление, история, биология и др. Следует заметить, что математическое моделирование представляет собой отдельную междисциплинарную область знаний с совокупностью объектов, подходов и методов исследования.

*Математической моделью* называется совокупность уравнений или других математических соотношений, отражающих основные свойства изучаемого объекта или явления в рамках принятой умозрительной физической модели и особенности его взаимодействия с окружающей средой на пространственно-временных границах области его локализации. Математические модели различных процессов в континуальных системах строятся, как правило, на языке дифференциальных



уравнений, позволяющих наиболее точно описать состояние процесса в любой точке пространства в произвольный момент времени. Основными свойствами математических моделей являются адекватность и простота, указывающие на степень соответствия модели изучаемому объекту и возможности ее реализации. Процесс формулировки математической модели называется *постановкой задачи* [8].

Под математическим моделированием можно понимать процесс построения и изучения математических моделей. Развернутое определение дано в работе [2]: математическое моделирование — это идеальное научное знаковое формальное моделирование, при котором описание объекта осуществляется на языке математики, а исследование модели проводится с использованием тех или иных математических методов.

## 2.2. Обобщенная математическая модель

Математическая модель описывает зависимость между исходными данными и искомыми величинами [4].

Элементами обобщенной математической модели являются (см. рис. 7):

- множество входных данных (переменные)  $X, Y$ ;  $X$  — совокупность варьируемых переменных;  $Y$  — независимые переменные (константы);
- математический оператор  $L$ , определяющий операции над этими данными, под которым понимается полная система математических операций, описывающих численные или логические соотношения между множествами входных и выходных данных (переменные);
- множество выходных данных (переменных)  $G(X, Y)$ ; представляет собой совокупность критериальных функций, включающую (при необходимости) целевую функцию.

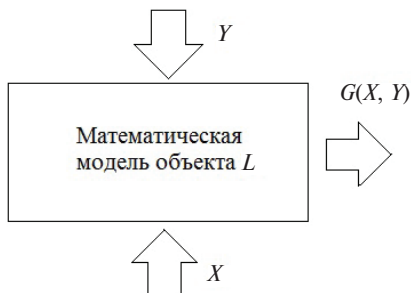


Рис. 7. Обобщенная математическая модель

Математическая модель является математическим аналогом проектируемого объекта. Степень адекватности ее объекту определяется постановкой и корректностью решений задачи проектирования.

Множество варьируемых параметров (переменных)  $X$  образует пространство варьируемых параметров  $R_x$  (пространство поиска), которое является метрическим с размерностью  $n$ , равной числу варьируемых параметров.

Множество независимых переменных  $Y$  образуют метрическое пространство входных данных  $R_y$ . В том случае, когда каждый компонент пространства  $R_y$  задается диапазоном возможных значений, множество независимых переменных отображается некоторым ограниченным подпространством пространства  $R_y$ .

Множество независимых переменных  $Y$  определяет среду функционирования объекта, т. е. внешние условия, в которых будет работать проектируемый объект.

Это могут быть:

- технические параметры объекта, не подлежащие изменению в процессе проектирования;
- физические возмущения среды, с которой взаимодействует объект проектирования;
- тактические параметры, которые должен достигать объект проектирования.

Выходные данные рассматриваемой обобщенной модели образуют метрическое пространство критериальных показателей  $R_C$ .

## 2.3. Нелинейность математических моделей

---

Простота моделей во многом связана с их линейностью. С точки зрения математики это соответствует принципу суперпозиции, при котором любая линейная комбинация решений в свою очередь тоже есть решение искомой задачи. Пользуясь принципом суперпозиции, можно, найдя решение в каком-либо частном случае, построить решение в более общей ситуации. В этой связи о закономерностях общего случая делается вывод на основе свойств частного. Для линейных моделей отклик объекта на изменение каких-то условий пропорционален величине этого изменения.

В случае отсутствия выполнения принципа суперпозиции для математических моделей знание о поведении части объекта нелинейного явления не дает информации о поведении всего объекта в целом. Большинство реальных процессов и соответствующих им математических моделей не линейны. Линейные модели являются неким приближением реального объекта и решают лишь частные случаи. Так, нелинейными становятся модели популяций при учете ограничения доступных ресурсов [1].

## 2.4. Степень соответствия математической модели объекту

---

Математическая модель никогда не бывает тождественна рассматриваемому объекту и не передает всех его свойств и особенностей. Она является лишь приближенным описанием объекта и носит всегда приближенный характер. Точность соот-

ветствия определяется степенью соответствия адекватности модели и объекта.

При построении математической модели приходится выдвигать дополнительные предположения — гипотезы. Модель поэтому еще называют гипотетической. Основным критерием применимости модели является эксперимент. Критерий практики позволяет сравнивать гипотетические модели и выбирать из них наиболее подходящую.

Каждый объект описывается ограниченным числом моделей или их систем. Процесс моделирования значительно легче реализуется при использовании унификации математических моделей, т. е. использования наборов готовых моделей. Существует возможность переноса готовых моделей из одних процессов на другие, идентичные, аналогичные. Аналогичными называют объекты и процессы, описываемые одинаковыми по форме уравнениями, содержащими различные физические величины и параметры, связанные между собой одинаковыми операторами. Величины, которые в аналогичных уравнениях стоят на одинаковых местах, называют аналогами.

Математическая модель описывает реальный объект с каким-то приближением. Степень соответствия описания реальному процессу определяется полнотой учета возмущающих воздействий. При отсутствии или незначительности возмущений, действующих как внутри, так и вне объекта, можно однозначно определить влияние входных и управляющих параметров на выходные.

## 2.5. Классификация математических моделей

---

В настоящее время существует огромное количество моделей самого разного типа, которые получили развитие в результате применения методов математического моделирования в различ-

ных областях. В связи с этим возникает необходимость в определенной классификации существующих и появляющихся математических моделей [2–3, 9]. Существуют следующие виды классификаций математических моделей в зависимости от:

- сложности объекта моделирования;
- оператора модели;
- входных и выходных параметров;
- цели моделирования;
- способа исследования модели;
- объектов исследования;
- принадлежности модели к иерархическому уровню описания объекта;
- характера отображаемых свойств;
- порядка расчета;
- использования управления процессом.

По сложности объекта исследования модели делятся на простые и исследующие объекты-системы (рис. 8). В простых моделях внутреннее строение объекта не рассматривается и составляющие его элементы и подпроцессы не учитываются. Объект-система является совокупностью взаимосвязанных элементов, которые взаимодействуют с окружающей средой как с единым целым.

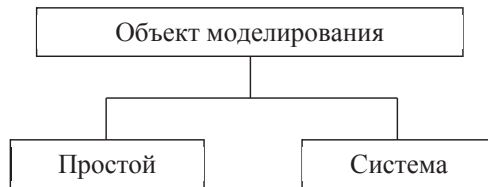


Рис. 8. Классификация математических моделей по сложности объекта

В зависимости от оператора модели они делятся на линейные, нелинейные, алгоритмические, простые и сложные (см. рис. 9). При наличии линейной зависимости выходных параметров

от входных математическая модель называется линейной, соответственно в случае нелинейной зависимости модель — нелинейная. При обеспечении оператором модели функциональной зависимости выходных параметров от входных в виде алгебраического выражения модель является простой. Модель, включающая системы дифференциальных и интегральных соотношений, называется сложной. В случае построения имитатора модели поведения объекта с помощью алгоритма его называют оператором модели. При этом сама модель является алгоритмической.



Рис. 9. Классификация математических моделей в зависимости от оператора модели

Классификация математических моделей *в зависимости от входных и выходных параметров* представлена на рис. 10.

По характеру моделируемого процесса модели подразделяются на:

- детерминированные, которые соответствуют детерминированным процессам, имеющим строго однозначную связь между физическими величинами, характеризующими состояние системы в какой-либо момент времени; детерминированная модель позволяет однозначно вычислить и предсказать значения выходных величин по значениям входных параметров и управляющих воздействий;
- неопределенные, которые исходят из того, что изменение определяющих величин происходит случайным образом

и значения выходных величин находятся в вероятностном соответствии с входными величинами и не определяются однозначно.



Рис. 10. Классификация математических моделей в зависимости от входных и выходных параметров

Модели с неопределенными параметрами можно подразделить на следующие группы [2]:

- **Стохастические** — значения всех или отдельных параметров модели определяются случайными величинами, заданными плотностями вероятности.
- **Случайные** — значения всех или отдельных параметров модели определяются случайными величинами, которые зависят от оценки плотностей вероятности, определяемой в результате обработки ограниченной экспериментальной выборки данных параметров.
- **Интервальные** — значения всех или отдельных параметров модели описываются интервальными величинами, задан-

ным интервалом, образованным минимальными и максимально возможными значениями параметра.

- Нечеткие — значения всех или отдельных параметров модели описываются функциями принадлежности соответствующему нечеткому множеству.

Модели по отношению к размерности пространства классифицируются на одномерные, двухмерные и трехмерные. Такое разделение применимо для моделей, имеющих в качестве параметров координаты пространства.

По отношению ко времени модели делят на динамические и статические. Некоторые характеристики моделей являются неизменными, т. е. не меняют своих значений в течение времени, а некоторые изменяются по определенным законам. Если состояние системы меняется со временем, то модели называют динамическими, в противном случае — статическими. Статическое моделирование служит для описания состояния объекта в фиксированный момент времени, а динамическое — для исследования объекта во времени.

Разделение моделей на качественные и количественные, дискретные и непрерывные, а также на смешанные происходит в зависимости от вида используемых множеств параметров модели.

*По целям моделирования* модели делятся на дескриптивные, оптимизационные и управленческие (см. рис. 11).

Среди целей дескриптивных моделей можно выделить установление законов изменения параметров модели. Примером данной модели является модель движения ракеты после запуска.

С помощью оптимизационных моделей можно рассчитывать оптимальные критерии параметров объекта моделирования. С другой стороны, данные модели могут применяться для поиска оптимального режима управления процессом. К оптимизационным моделям можно отнести модель ракеты из предыдущей модели с целью подъема на необходимую высоту за ограниченное время.



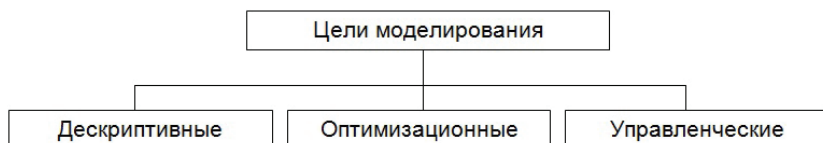


Рис. 11. Классификация математических моделей в зависимости от целей моделирования

С целью принятия эффективных управленческих решений в областях жизнедеятельности человека применяются управленческие модели.

В зависимости от метода реализации модели делят на аналитические, если возможно получить выходные параметры в виде аналитических выражений, и на алгоритмические, позволяющие получить лишь приближенные значения искомых параметров (рис. 12).

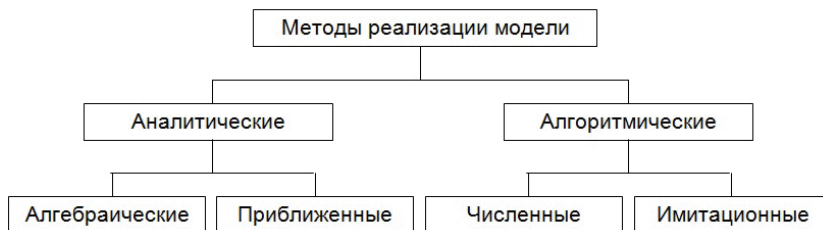


Рис. 12. Классификация математических моделей в зависимости от метода реализации модели

По объектам исследования математические модели классифицируют на:

- объекты с высокой степенью информации, если в процессе моделирования известны полные системы уравнений, описывающие все стороны моделируемого процесса и все числовые значения параметров этих уравнений;

- объекты с нулевым уровнем информации; математическая модель такого объекта строится на основе статистических экспериментальных данных;
- объекты с известными основными закономерностями; значения констант в математических уравнениях описания модели устанавливают из опыта;
- объекты, о поведении которых имеются сведения эмпирического характера; для них используют методы физического моделирования с применением математического планирования эксперимента.

*По принадлежности модели к иерархическому уровню описания объекта. Иерархический уровень включает:*

- микроуровень (типовыми процессами являются массообменные, теплофизические, гидродинамические), моделирование осуществляется в целях синтеза технологического процесса для отдельного или нескольких агрегатов;
- макроуровень — моделирование процессов, имеющих более высокий уровень агрегации; модели применяют для синтеза текущего управления технологическим процессом для одного агрегата или технологического комплекса в целом;
- метауровень — моделирование процессов в совокупности агрегатов и связывающих их материально-энергетических потоков; такие модели служат для синтеза технологического комплекса как единого целого, то есть для синтеза управления развитием.

*По характеру отображаемых свойств модели подразделяют на:*

- функциональные модели, используемые для описания физических и информационных процессов, протекающих при функционировании объекта;
- структурные, описывающие состав и взаимосвязи элементов системы (процесса, объекта).

*Классификация математических моделей по порядку расчета.*

Подразделяют на прямые, обратные, индуктивные:

- прямые применяются для определения кинетических, статических и динамических закономерностей процессов;
- обратные (инверсионные) используются для определения, например, допустимых отклонений режимов обработки;
- индуктивные применяются для уточнения математических уравнений кинетики, статики или динамики процессов с использованием новых гипотез или теорий.

Специфические особенности всех видов моделей отражаются, прежде всего, в задании и форме начальных и граничных условий.

В прямых моделях кинетические закономерности характеризуют течение процесса во времени и устанавливают изменение во времени его параметров: концентраций, температур, химического состава при известных потоках и параметрах рабочих тел. Статические закономерности определяют конечные критические и равновесные значения параметров процесса и рабочего компонента. Уравнения статики получают в основном при обработке экспериментальных данных. Динамические закономерности определяют свойства объектов при разработке систем автоматического регулирования. Динамические свойства задаются характером выходной реакции объекта на стандартные возмущения на входе. Под стандартными возмущениями в химической технологии подразумевают, например, изменение концентрации, давления, температуры и др. Решение применяемой в модели системы дифференциальных уравнений представляется в виде отношения изображения выходного сигнала к изображению входного сигнала, которое называется передаточной функцией.

Обратные (инверсные) модели применяют для определения значения входных параметров или других заданных свойств обрабатываемых веществ или продуктов, а также для определения допустимых отклонений режимов обработки, не оказывающих существенного влияния на качество продукта или показатели про-

цесса. При определении входных параметров исходят из продолжительности процесса, заданных величин конечных параметров или оптимальных свойств выходных продуктов (химического состава, физических свойств и др.). Обратные модели применяют для моделирования кинетических, статических и динамических обратных задач. Как правило, обратными задачами являются задачи оптимизации процессов и параметров аппаратов.

Индуктивные модели необходимы для установления или уточнения математических уравнений кинетики, статики и динамики процессов и чаще всего реализуются экспериментально или аналитически с использованием новых гипотез, форм описания или теорий с последующей проверкой адекватности математического описания. Адекватность математического описания в регрессионных моделях оценивается сопоставлением результатов статистической обработки пробных опытов, проведенных при одних и тех же параметрах процесса, с расчетными значениями величин, вычисленных на основе математической модели.

Классификация математических моделей в зависимости от использования управления процессом

Математические модели делятся на:

1. Модели прогноза, или расчетные модели без управления.

Основное назначение этих моделей — дать прогноз о поведении системы во времени и в пространстве, зная начальное состояние и информацию о поведении ее на границе.

Примерами могут служить модели распределения тепла, электрического поля, химической кинетики, гидродинамики.

2. Оптимизационные модели:

- стационарные модели используются на уровне проектирования различных технологических систем;
- динамические — как на уровне проектирования, так и, главным образом, для оптимального управления различными процессами — технологическими, экономическими и др.

В задачах оптимизации имеется два направления.

К первому относятся детерминированные задачи. Вся входная информация в них является полностью определяемой.

Второе направление относится к стохастическим процессам. В этих задачах некоторые параметры носят случайный характер или содержат элемент неопределенности.

Методы отыскания экстремума функции многих переменных с различными ограничениями часто называются методами математического программирования.

Содержательная классификация моделей

В работе [10] дана классификация математических моделей, используемых в физике и в естественных науках. В книге [11] эта классификация проанализирована и расширена. Она сфокусирована на этапе построения содержательной модели.

1. Гипотеза. Эти модели «представляют собой пробное описание явления, причем автор либо верит в его возможность, либо считает даже его истинным». Пример: модель Солнечной системы по Птолемею и модель Коперника (усовершенствованная Кеплером), модель атома Резерфорда и модель Большого Взрыва. Если модель первого типа построена, то это означает, что она временно признается за истину и можно сконцентрироваться на других проблемах. Однако это не может быть точкой в исследованиях, но только временной паузой: статус модели первого типа может быть только временным.

2. Феноменологическая модель. Данная модель содержит механизм для описания явления. Однако этот механизм недостаточно убедителен и не может быть подтвержден имеющимися данными или плохо согласуется с имеющимися теориями и накопленным знанием об объекте. Поэтому феноменологические модели имеют статус временных решений. Считается, что ответ все еще неизвестен, и необходимо продолжить поиск «истинных механизмов». Пример: модели теплорода и кварковая модель элементарных частиц. Роль модели в исследовании

может меняться со временем, может случиться так, что новые данные и теории подтвердят феноменологические модели и те будут повышены до статуса гипотезы. Аналогично, новое знание может постепенно придти в противоречие с моделями-гипотезами первого типа и те могут быть переведены во второй. Так, кварковая модель постепенно переходит в разряд гипотез; атомизм в физике возник как временное решение, но с ходом истории перешел в первый тип. А вот модели эфира и сейчас находятся вне науки.

3. Приближение. Если можно построить уравнения, описывающие исследуемую систему, то это не значит, что их можно решить даже с помощью компьютера. Общепринятый прием в этом случае — использование приближений. Уравнения заменяются линейными. Стандартный пример — закон Ома.

4. Упрощение. В данной модели отбрасываются детали, которые могут заметно и не всегда контролируемо повлиять на результат. Примеры: применение модели идеального газа к неидеальному, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, большинство моделей физики твердого тела, жидкостей и ядерной физики. Путь от микроописания к свойствам тел (или сред), состоящих из большого числа частиц, очень длинен. Приходится отбрасывать многие детали.

5. Эвристическая модель. Эвристическая модель сохраняет лишь качественное подобие реальности и дает предсказания только «по порядку величины». Типичный пример — приближение средней длины свободного пробега в кинетической теории. Оно дает простые формулы для коэффициентов вязкости, диффузии, теплопроводности, согласующиеся с реальностью по порядку величины. Но при построении новой физики далеко не сразу получается модель, дающая хотя бы качественное описание объекта. В этом случае часто используют модель по аналогии, отражающую действительность хоть в какой-нибудь черте.

6. Аналогия. Данная модель впервые возникла, когда взаимодействие в системе нейтрон-протон пытались объяснить

посредством взаимодействия атома водорода с протоном. Эта аналогия и привела к заключению, что должны существовать обменные силы взаимодействия между нейтроном и протоном, которые аналогичны обменным силам в системе  $\text{H} - \text{H}^+$ , обусловленным переходом электрона между двумя протонами.

7. Мысленный эксперимент. Сюда можно отнести рассуждения, которые в конечном итоге приводят к противоречию.

8. Демонстрация возможности. Это тоже мысленные эксперименты с воображаемыми сущностями, демонстрирующие, что предполагаемое явление согласуется с базовыми принципами и внутренне непротиворечиво. Один из самых знаменитых таких экспериментов — геометрия Лобачевского (Лобачевский называл ее «воображаемой геометрией»).

## Контрольные вопросы и задания

1. Что такое математическая модель и математическое моделирование?
2. Назовите элементы обобщенной математической модели.
3. Перечислите признаки, по которым классифицируются математические модели.
4. В чем отличие простых моделей от сложных?
5. Перечислите типы моделей в зависимости от применяемого оператора моделирования.
6. Как классифицируются модели в зависимости от входных и выходных параметров?
7. Чем отличаются дескриптивные и управленческие модели?
8. Для каких целей применяются прямые и обратные модели?
9. В чем отличие моделей прогноза от оптимизационных моделей?
10. Опишите типы содержательной классификации моделей.

---

## 3. Построение математической модели и вычислительный эксперимент

---

### 3.1. Этапы построения математической модели

---

**П**остроение 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. рис. 13) [1–2]:

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 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. 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.

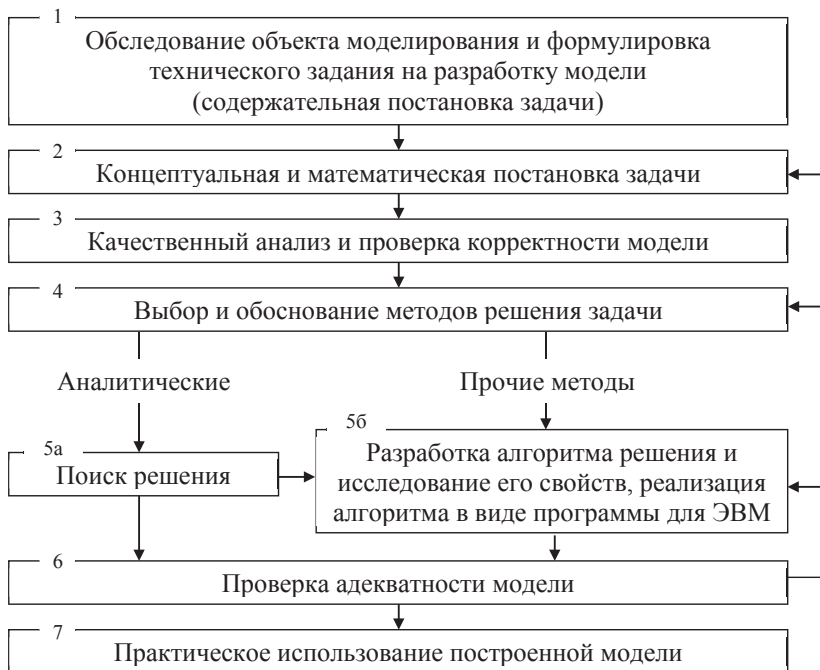


Рис. 13. Этапы построения математической модели

*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 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 скорости 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.

### 3.2. 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 приспособляется 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. Вспомним модели Томсона, Резерфорда, Бора.

Среди подходов к разработке математических моделей относят [12]:

**1. Фундаментальные законы природы.** Данный принцип является самым распространенным и заключается в использовании фундаментальных законов природы применительно к конкретной 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 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 уни-

фикацию 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 математических 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.

### 3.3. 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 [5].

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 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 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 несовершенных 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 особенности конкретных задач [3, 5, 13–14].

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 (рис. 14):

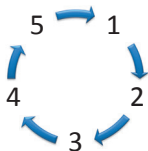


Рис. 14. Схема технологического цикла вычислительного эксперимента:

- 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 [2]:

- Неустраняемая 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 [2]:

- 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 [15]:

- 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 программ-

ный комплекс является сложной системой, содержащей языки программирования, трансляторы, компиляторы и библиотеки стандартных модулей. Процесс разработки программ можно разделить на следующие этапы [16]:

- 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 [3]:

6. Проведение натурального 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 натуральных 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 различных областях науки и техники [3]:

- *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 используется для расчета движения летательных средств, задач аэродинамического сопротивления, а также для анализа радиолокационных данных, например, изображений со спутников. Ключевую роль в данном 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 и изучения химических процессов на различных уровнях.
- *Биология.* Наибольший интерес к моделированию вызван необходимостью решения фундаментальных проблем генетики и морфогенеза, а также созданием новых перспективных методов биотехнологии.

### 3.4. Имитационное моделирование

---

В настоящее время не существует единой точки зрения по вопросу о том, что понимать под имитационным моделированием. Определений термина «имитационное моделирование» к настоящему времени существует большое количество [17–18].

*Имитационное моделирование* — метод, позволяющий строить модели, описывающие процессы так, как они проходили бы в действительности. Такую модель можно «проиграть» во времени как для одного испытания, так и заданного их множества. При этом результаты будут определяться случайным характером 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 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.

*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 системы, 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.

### **3.4.1. 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 [19]. 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 и последующее вычисление функции. Когда пространство всех исходов и вероятностная мера слишком сложны, розыгрыш проводится последовательно в несколько этапов. Случайный выбор на каждом этапе проводится с помощью случайных чисел, например, генерируемых каким-либо физическим датчиком; употребительна 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, не требуют 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.

### **3.4.2. Метод Монте–Карло**

При существовании теоретического описания метода на протяжении длительного периода времени метод Монте–Карло получил широкое распространение только с появлением ЭВМ, т. е. задача генерации и использования в расчетах случайных величин достаточно трудоемкая задача.

*Метод 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 [20–21]. Название метода происходит от одноименного города в княжестве Монако, где развита игорная индустрия, поскольку наиболее 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 числа  $\pi$  с помощью случайных бросаний иглы на разграфленную параллельными линиями бумагу. Существо дела заключается в том, чтобы экспериментально воспроизвести событие, вероятность которого выражается через число  $\pi$ , и приблизительно 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 математики (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 естественностью 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 последующим 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 единица, 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  $[0, 1]$ .

Недостатки этого метода генерации:

- 1) Вероятное отсутствие равновероятности нулей и единиц из-за неисправности электронных генераторов шума.
- 2) Невозможность воспроизводимости случайной последовательности 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 описании. Указанные алгоритмы и функции постоянно проверяются, 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  $n_{12} = 27489049$ . Берем 4 средние цифры из этого числа и обозначаем их как  $n_2 = 4890$ . После возведем уже новое число в квадрат  $n_{22} = 23912100$  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 последовательном получении следующего значения из предыдущего.

Преимущества методов получения псевдослучайных чисел:

1) Скорость получения случайных чисел пропорциональна 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 одностипных 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  $a$ :

$$a \approx a^* = \bar{x}. \quad (1)$$

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 предположений о регулярности, за исключением 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 испытаний (разыграно  $n$  возможных значений  $X$ ) и по ним была найдена выборочная средняя  $\bar{x}$ , которая принята в качестве искомой оценки:  $a^* = \bar{x}$ . 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 невозможно. Естественно возникает вопрос о величине допускаемой ошибки. Ограничимся отысканием лишь верхней границы  $\delta$  допускаемой ошибки с заданной вероятностью (надежностью)  $\gamma$ :

$$P(|\bar{X} - a| \leq \delta) = \gamma. \quad (2)$$

Интересующая нас верхняя грань ошибки  $\delta$  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  $\sigma$  известно. В этом случае с надежностью  $\gamma$  верхняя граница ошибки

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

где  $n$  — число испытаний (разыгранных значений  $X$ );  $t$  — значение аргумента функции Лапласа, при котором  $\Phi(t) = \frac{\gamma}{2}$ ,  $\sigma$  — известное среднее квадратичное отклонение  $X$ .

2. Случайная величина  $X$  распределена нормально, причем ее среднее квадратическое отклонение  $\sigma$  неизвестно. В этом случае с надежностью  $\gamma$  верхняя граница ошибки

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

где  $n$  — число испытаний;  $s$  — «исправленное» среднее квадратическое отклонение,  $t_\gamma$  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  $\gamma$ , верхняя граница ошибки может быть вычислена по формуле (3), если среднее квадратическое отклонение  $\sigma$  случайной величины  $X$  известно; если же  $\sigma$  неизвестно, то можно подставить в формулу (3) его оценку  $s$  — «исправленное» среднее квадратическое отклонение либо воспользоваться формулой (4). Заметим, что чем больше  $n$ , тем меньше различие между результатами, которые дают обе формулы. Это объясняется тем, что при  $n \rightarrow \infty$  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, составляется 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.

### 3.5. Примеры математических моделей в физике, химии, биологии

---

#### **3.5.1. Модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы, твердого и деформируемого тела**

Можно привести много примеров, когда моделирование могло 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 математизации, 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 [2]. Одной из первых линейных моделей является всем хорошо известный закон Гука:

$$F = -kx, \quad (5)$$

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 продвигаться 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 математической 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:

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

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 Максвелла.

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

где  $E$  — вектор напряженности электрического поля,  $D$  — вектор электрической индукции,  $B$  — вектор магнитной индукции,  $H$  — вектор напряженности магнитного поля,  $p$  — плотность 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.

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

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

где  $\Psi$  — 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 выражения уравнений баланса для сплошной среды могут быть представлены в двух формах [8]:

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(pa) + \operatorname{div} \bar{I}_A^0 = \omega_A^0, \quad (9)$$

где  $A$  — произвольная экстенсивная характеристика,  $a$  — соответствующая ей удельная величина в точке физического пространства,  $p$  — объемная плотность массы вещества,  $\bar{I}_A^0$  — вектор плотности тока величины  $A$ ,  $\omega_A^0$  — плотность производства  $A$  внутри объема;

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

$$p \frac{\partial a}{\partial t} + \operatorname{div} \bar{I}_A = \omega_A. \quad (10)$$

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

$$p \frac{d\bar{v}}{dt} = \sum_k \bar{F}_k, \quad (11)$$

где  $p$  — объемная плотность массы среды;  $v$  — скорость среды;  $\vec{F}_k$  — внешние силы (отнесенные к единице объема), действующие на индивидуальный объем сплошной среды.

**Уравнение непрерывности.** В качестве второго примера можно привести аналитическую форму закона сохранения массы в гидрогазодинамике, которое является дифференциальным уравнением непрерывности. Для получения этого уравнения воспользуемся локальным или материальным уравнением баланса массы системы. Примем в качестве экстенсивной характеристики  $A$  массу системы. При отсутствии производства вещества в объеме системы ( $\omega_A = 0$ ), учитывая, что  $a = 1$ ,  $\vec{v}_A = \vec{v}$  (перенос массы осуществляется только гидродинамическим потоком), получим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (12)$$

Выражение (12) есть локальная форма уравнения непрерывности. Изменение плотности вещества движущейся частицы определяется выражением

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \langle \vec{v}, \nabla \rho \rangle. \quad (13)$$

Учитывая, что  $\text{div}(\rho \vec{v}) = \langle \vec{v}, \nabla \rho \rangle + \rho \text{div}(\vec{v})$ , из выражений (12) и (13) получаем

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \text{div}(\vec{v}) = 0. \quad (14)$$

Выражение (14) — материальная форма уравнения непрерывности.

**Уравнение диффузии.** Эффективная плотность многокомпонентной смеси согласно определению находится как сумма плотностей отдельных компонентов  $\rho_e = \rho_1 + \dots + \rho_k + \dots + \rho_n$ . Массовая концентрация компонентов представляет собой отношение плотности  $k$ -компонента к эффективной плотности смеси  $c_k = \rho_k / \rho_e$ . Эта характеристика смеси может быть отождествле-

на с удельной экстенсивной характеристикой системы  $a$ , поскольку представляет массу  $k$ -компонента, приходящуюся на единицу массы смеси. В таком случае можно записать уравнение баланса массы  $k$ -компонента смеси в виде

$$\rho_e \frac{dc_k}{dt} + \operatorname{div} \vec{I}_k = \omega_k. \quad (15)$$

Неравномерное распределение вещества  $k$ -компонента в объеме смеси порождает потоки вещества, стремящиеся сгладить эту неравномерность. Величина плотности этих потоков определяется эмпирическим законом Фика

$$\vec{I}_k = -D_k \cdot \nabla c_k, \quad (16)$$

где  $D_k$  — коэффициент диффузии  $k$ -компонента в смеси, который в общем случае зависит от концентрации  $c_k$ ;  $\omega_k$  — производство вещества  $k$ -компонента в смеси в единице объема в единицу времени.

Подстановка последнего выражения в уравнение материального баланса  $k$ -компонента приводит к уравнению диффузии

$$\rho_e \frac{dc_k}{dt} = \operatorname{div}(D_k \cdot \nabla c_k) + \omega_k. \quad (17)$$

Материальная скорость изменения концентрации при этом определяется выражением

$$\frac{dc_k}{dt} = \frac{\partial c_k}{\partial t} + \langle \vec{v}_k, \nabla c_k \rangle. \quad (18)$$

Уравнения движения жидкостей и газа

Формы уравнений движения жидкости и газа в идеальной среде принимают следующий вид:

$$p \frac{d\vec{v}}{dt} = p \vec{f}_m - \nabla p. \quad (19)$$

Полученное уравнение называется уравнением Эйлера. Данное уравнение часто используется для решения различных прикладных задач гидродинамики и газодинамики. В частности, интегрированием этого уравнения при постоянной плотности жидкости получается известное уравнение Бернулли для несжимаемой жидкости

$$\frac{\rho v^2}{2} + p = \text{const}. \quad (20)$$

Для движения вязкой несжимаемой жидкости с постоянным коэффициентом вязкости  $\mu$  получаем

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \vec{f}_m - \nabla p + \mu \Delta \vec{v}. \quad (21)$$

Это уравнение называется уравнением Навье—Стокса. Уравнения Навье—Стокса являются одними из важнейших в гидродинамике и применяются в математическом моделировании многих природных явлений и технических задач.

Будучи дополненной уравнениями переноса тепла и переноса массы, а также соответствующих массовых сил, система уравнений Навье—Стокса может описывать конвекцию, термодиффузию в жидкостях, поведение многокомпонентных смесей различных жидкостей и т. п.

Если же в уравнение в качестве массовой силы ввести силу Лоренца и дополнить систему уравнениями Максвелла для поля в сплошной среде, то модель позволяет описывать явления электро- и магнитогидродинамики. В частности, такие модели успешно применяются при моделировании поведения плазмы, межзвездного газа.

Одним из применений системы уравнений Навье—Стокса является описание течений в мантии Земли («проблема динамо»).

Также вариации уравнения Навье—Стокса используются для описания движения воздушных масс атмосферы, в частности



при формировании прогноза погоды. Для описания реальных течений в различных технических устройствах приемлемую точность численного решения можно получить только при такой расчетной сетке, ячейки которой меньше самого мелкого вихря. Это требует очень больших затрат расчетного времени на современных компьютерах. Поэтому были созданы различные модели турбулентности, упрощающие расчет реальных потоков.

Если по каким-либо причинам в уравнении Навье—Стокса можно отбросить инерционные члены, то получим уравнение, которое называется уравнением Стокса:

$$\mu \Delta \vec{v} = \nabla p - \rho \vec{f}_m. \quad (22)$$

### 3.5.2. Модели в химии

Первая попытка по применению математики в химии была сделана М. В. Ломоносовым в его рукописи «Элементы математической химии». Книга была написана предположительно в сентябре 1741 года. Ломоносов по аналогии с работой И. Ньютона намеревался написать подобный химический трактат, в котором он хотел изложить все существующее на тот момент химическое знание в аксиоматической манере. В XIX веке понятие «математическая химия» начал использовать Дюбуа—Реймон. Первым математиком, который заинтересовался комбинаторными аспектами химии, считается Артур Кэли, опубликовавший работу по перечислению алкановых изомеров в ведущем химическом журнале. Эта работа фактически является первой работой по применению теории графов в химии. В 1894 г. была издана книга Дж. Хелма под названием «Принципы математической химии». 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 мо-

делирование гипотетически возможных физико-химических и химических явлений и процессов, а также их зависимость от свойств атомов и структуры молекул. Математическая химия допускает построение моделей без привлечения квантовой механики. Критерием истины в математической химии являются математическое доказательство, вычислительный эксперимент и сравнение результатов с экспериментальными данными. Важнейшую роль в математической химии играет математическое моделирование с использованием компьютеров. В связи с этим математическую химию, в узком смысле, иногда называют компьютерной химией, которую не следует путать с вычислительной химией [22].

В математической химии разрабатывают новые приложения математических методов в химии. Новизна обычно выражается одним из двух способов:

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

При этом используемые математические средства чрезвычайно разнообразны. В отличие от чисто математических наук, в математической химии исследуются химические задачи и проблемы методами современной математики.

Самой известной моделью математической химии является молекулярный граф. Отметим, что строгое математическое и физическое обоснование модель молекулярного графа нашла лишь в теории Р. Бейдера. По существу теория Р. Бейдера является новым языком современной математической и теоретической химии, составляющими элементами которого являются различные математические, в том числе топологические, характеристики электронной плотности.

Молекулярный граф — связный неориентированный граф, находящийся во взаимно однозначном соответствии со структурной формулой химического соединения таким образом, что вершинам графа соответствуют атомы молекулы, а ребрам гра-

фа — химические связи между этими атомами. На рис. 15 показан пример молекулярного графа для этилена [23].

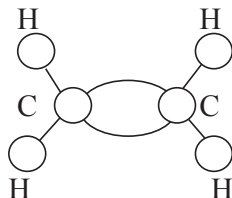


Рис. 15. Молекулярный граф этилена

Другие знаменитые модели — это закон действующих масс, созданный математиком К. Гульдбергом и химиком-экспериментатором П. Вааге, граф механизма химических превращений и дифференциальные уравнения химической кинетики.

В математической химии применяются следующие методы [23]:

- Теория графов, используемая в математических исследованиях изомерии и топологических индексов, применяемая в проблемах химической кинетики.
- Топология, применяемая в стереохимии и исследовании свойств поверхностей потенциальной энергии.
- Теория узлов.
- Комбинаторика.
- Теория групп, которая активно применяется в квантовой химии и стереохимии.
- Фрактальная геометрия.
- Теория нелинейных дифференциальных уравнений, которая активно применяется в химической кинетике.
- Теория динамических систем.
- Теория катастроф и бифуркаций, применяемая для описания структурных изменений в молекулах.
- Операторные алгебры, применяемые в квантовой химии.
- Математическая логика.

- Теория информации и методы искусственного интеллекта, применяемые в химической информатике (хемоинформатике).
- Теория интегродифференциальных уравнений, применяемая для описания процессов, протекающих на неоднородных поверхностях (гетерогенный катализ и адсорбция).

### **3.5.3. 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 [24].

#### 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 [2]. 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 ограничен 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 биологических 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 французский 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 моделировании физико-химических условий существования живых организмов или их органов и клеток: подобраны растворы неорганических и органических веществ (растворы Рингера, Локка, Тироды 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. МакКаллока и У. Питса строятся логико-математические модели взаимодействия нейронов. Системы дифференциальных и интегральных уравнений положены в основу моделирования биоценозов (В. Вольтерра, А. Н. Колмогоров).

#### Модель «хищник–жертва»

Математическая модель наиболее простой, т. е. двухвидовой системы «хищник–жертва», основывается на следующих предположениях [1]:

- 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;

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

где  $\alpha$  и  $\beta$  — 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

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

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

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 взаимодействий 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 популяционной 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 изменения могут быть очень небольшими.

Математические модели синтетической теории эволюции были разработаны Р. Фишером, Дж. Холдейном и С. Райтом. В основном эта математическая теория классической популяционной 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 модели предполагают, что численность популяции бесконечно 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 сделана 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 ему 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?

---

## 4. Многомасштабное моделирование материалов и процессов

---

**В** течение последних десятилетий в материаловедении и других отраслях техники доминировали методы континуальной механики (непрерывная или волновая: гидродинамика, акустика, теория упругости и другие области физики). В соответствии с этим подходом среда считается непрерывной, бесструктурной, а каждый элемент ее объема взаимодействует со всеми соседними элементами по законам классической механики. Однако многочисленные экспериментальные наблюдения за поведением материалов, особенно в наномасштабе, свидетельствуют о ряде явлений, не поддающихся объяснению в рамках континуальной механики. Среди них можно выделить наличие поверхностной шероховатости, неоднородность пластической деформации и др. В связи с чем возникает необходимость найти фундаментальное описание механических свойств материалов, исходя из свойств и строения атомов, молекулярных систем и нанокластеров.

Необходимость многомасштабного моделирования обусловлена существенным различием между объемом необходимых расчетов и ограниченностью вычислительных ресурсов. В процессе внедрения многомасштабного подхода в проектировании наносистем можно отметить два направления:

- Применение разных методик моделирования к различным элементам системы, например, квантовых методов — к реакциям, а молекулярной механики — к структурам,

несущим реакционные центры или ограничивающим их положение. Такой подход был реализован для моделирования соотношений структура — свойство — функция в энзимах. Важной задачей является распространение этого принципа на смешанные модели других видов.

- Доработка конструкции. Для этого сначала с помощью недорогих и сравнительно неточных методик выявляются перспективные системы, которые затем исследуют более точными и затратными методами. Такой подход повышает скорость оценки конструкции с учетом априори известных ограничений используемых моделей, что повышает производительность проектирования. Необходимо обеспечить постепенность интеграции этой методологии в технологии атомарной точности.

Использование компьютерного моделирования для наносистем имеет принципиальные трудности:

- отсутствует дальний порядок, свойственный кристаллам и позволяющий уменьшить число независимых степеней свободы системы;
- ближний порядок, характерный для жидкостей, не позволяет определить все функциональные свойства наноматериалов;
- технические трудности, связанные с моделированием на атомном уровне макрообъектов. Прямое моделирование таких систем в приближении молекулярной динамики и, тем более, квантовой механики затруднительно даже с использованием современной суперкомпьютерной техники. Решением может являться использование в моделировании иерархического многомасштабного подхода, когда на каждом нижнем уровне вычисляются параметры и переменные, необходимые для построения моделей верхнего уровня.

## 4.1. Виды многомасштабного моделирования

Центральная проблема многомасштабного моделирования состоит в обеспечении самосогласованности расчетов, учитывающих внутренние степени свободы компонентов и сохранение молекулярной информации на всех пространственных шкалах и во всем диапазоне времени для всех стадий физико-химического процесса, протекающих в разных агрегатных состояниях. Это особенно важно для нанообъектов, так как для них существенен большой вклад границ раздела фаз и необходимо описывать разные фазы с одинаковой точностью [25].

Концепция многомасштабного моделирования обычно интерпретируется как моделирование системы с использованием различных масштабов (размеров). Есть несколько подходов к реализации и представлению исследуемой системы, обычно они не связаны, т. е. каждый из возможных подходов осуществляется отдельно и независимо от других. В зависимости от способа информационного обмена между уровнями моделирования методы многомасштабного моделирования можно условно разделить на три группы:

- Иерархические. Является эффективным для пластических однофазных систем.
  - Метод конечных элементов для атомных масштабов.
  - Гибридная многомасштабная вычислительная процедура.
  - Полноатомные модели.
- «Совмещенные». Важны для изучения неоднородной деформации, поведения многофазных материалов и наножидкостей.
  - Метод конечных элементов.
  - Метод молекулярной динамики.
  - Метод сильной связи.
  - Квазиконтинуальный метод.
- С многомасштабными граничными условиями.

В рамках иерархических методов атомные свойства тела формулируются в континуальном масштабе таким образом, чтобы мелкие шкалы зависели от крупных шкал некоторым предсказуемым образом. Иерархический подход основан на предположении о гомогенном характере деформации. Трудность возникает при моделировании дефектов атомных решеток и др. Например, метод конечных элементов для атомных масштабов (АМКЭ), используемый для многомасштабного моделирования, имеет точно такую же формальную структуру, как и континуальный метод конечных элементов, и, таким образом, может быть плавно совмещен с атомарным уровнем. АМКЭ использует обе, первую и вторую, производные энергии системы в вычислениях ее минимума.

Метод конечных элементов ориентирован на расчеты систем, имеющих сложную геометрическую конфигурацию и нерегулярную физическую структуру. В методе КЭ задача поиска функции заменяется на задачу поиска конечного числа ее приближенных значений в отдельных точках-узлах [25].

Метод конечных элементов применяется для моделирования намагничивания сверхпроводников (изменения параметра порядка и распределения сверхтока в сверхпроводниках различной конфигурации) [26], напряженно-деформированного состояния в гетероструктуре с «квантовой точкой» в отсутствие покрывающего слоя [27], а также для точного расчета эффективных параметров композитных сред (эффективный показатель поглощения, отражательная и пропускная способности композитного монослоя) [28].

Разработан способ моделирования с использованием гибридной многомасштабной вычислительной процедуры, идея которой состоит в сохранении полного молекулярного описания системы в тех областях, где это представляет наибольший интерес, и использовании модели «грубых зерен» в остальных областях системы. Это стало возможным благодаря соединению молекулярной динамики с мезоскопическим описанием



реальных жидкостей, основывающимся на флуктуационной гидродинамике Ландау.

В случае «совмещенных» методов многомасштабного моделирования поведение системы в каждой размерной шкале зависит от ее поведения в других шкалах. Соответствующие модели для каждой размерной шкалы уже разработаны: континуальная механика для макроупругих сред, молекулярная динамика с квантовомеханической связью для больших групп молекул. Между различными шкалами существует очень сложная взаимосвязь, которая нуждается в четком определении и сглаженности.

При использовании «совмещенных» методов возникает, естественно, ряд методологических вопросов: как разделить шкалы, что является адекватным механизмом для связи атомного и континуального моделирования, как интегрировать результаты различных шкал моделирования и др. Для их решения предлагается, в частности, ввести так называемую область соединения, где совмещаются методы моделирования в различных масштабах: конечных элементов, молекулярной динамики и сильной связи. В группу «совмещенных» методов входит также квазиконтинуальный метод, в котором соединяются методы молекулярной динамики и конечных элементов. Связь между ними осуществляется через ячейку «адаптации», позволяющей осуществлять перемещение от квазиконтинуального масштаба до атомного уровня.

Кроме вышеназванных имеется метод молекулярной динамики, сочетающий квантовомеханическое описание объектов и использование модели классических сил. Разные типы описания исследуемой системы совмещаются в единую объединенную схему, которая основана на идее усиления (уточнения) уникальных, легко параметризующихся моделей сил путем включения в такие модели (во время выполнения программы) квантовомеханической информации, необходимой для более точного определения траекторий движения.

Примером применения метода сильной связи для нанотехнологий является моделирование структуры и устойчивости полимеров на основе фуллеренов [29]. В работе исследованы различные возможные изомеры кластерных молекул, состоящих из двух фуллеренов  $C_{20}$ , и были обнаружены десять различных изомеров, два из которых наиболее устойчивых изомера представлены на рис. 16. В работе также получены устойчивые двух- и трехмерные структуры на основе фуллеренов.

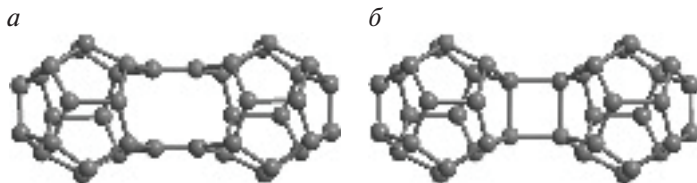


Рис. 16. Изомеры кластерных молекул, состоящих из двух фуллеренов  $C_{20}$ :  
 $a$  — open\_[2 + 2];  $b$  — [2 + 2]

Суть этого метода заключается в учете направленных ковалентных связей в рамках эмпирического гамильтониана сильной связи. Такой способ позволяет учесть квантовомеханическую природу ковалентной связи. При этом метод оказывается применим к большому разнообразию кристаллических углеродных полимеров. Этот метод выгодно отличается от большинства классических подходов тем, что позволяет более точно определить вклад электронной подсистемы в полную энергию. При этом учитываются четыре валентных электрона каждого атома углерода, а межатомный потенциал фактически является  $N$ -частичным, где  $N$  — число атомов в системе. Хотя метод сильной связи и не является таким строгим, как первопринципные методы, он, с одной стороны, достаточно хорошо описывает как малые углеродные кластеры, так и макроскопические формы углерода, а с другой — сильно упрощает расчеты даже для сравнительно больших кластеров, позволяя, в частности, исследовать динамику кластеров и набрать статистику, доста-

точную для определения энергии активации распада и времени жизни метастабильного состояния.

Методы многомасштабных граничных условий не включают в явном виде модель континуальной среды, чтобы не возникало проблем с разделением шкал. Многомасштабные граничные условия используются в основном в «совмещенных» методах моделирования, чтобы представить атомное поведение системы в континуальной среде. Это приводит к плавной связи между методами конечных элементов и молекулярной динамики без привлечения искусственной области «сшивки» атомной системы с континуальной средой.

Существуют также так называемые гибридные методы, целью которых является соединение областей с несравнимыми масштабами времени и длины.

## 4.2. Многомасштабное моделирование энергетических процессов

---

Из-за отсутствия теоретических представлений о природе и механизме ядерных сил существует несколько разных моделей атомного ядра, однако ни одна из них не может объяснить все многообразие экспериментальных данных. Поэтому каждая модель в силу своей ограниченности используется для выяснения только отдельных ядерных процессов. Выделяют две наиболее распространенные модели ядра: капельную модель и модель ядерных оболочек (оболочечную модель).

Капельная модель атомного ядра основана на совпадении некоторых свойств ядра и капли жидкости:

- Между молекулами капли проявляются короткодействующие молекулярные силы.
- Каждая молекула взаимодействует только с близлежащими молекулами.

- Движение молекул хаотично, они часто сталкиваются и обмениваются своей энергией.
- Поверхностные молекулы в капле односторонне связаны с внутренними, в результате этого возникают поверхностные силы натяжения и капля приобретает круглую форму, т. е. имеет минимальную поверхность при данном объеме.
- Плотность капли жидкости не зависит от ее размера.

Таким образом, в соответствии с капельной моделью ядро представляют в виде капли ядерной жидкости, в которой нуклоны движутся интенсивно и беспорядочно, испытывая многочисленные столкновения. Каждое такое столкновение сопровождается сильным взаимодействием нуклонов, между ними происходит обмен энергией и импульсом. Размеры и устойчивость ядерной капли сохраняются с помощью поверхностных сил ядерного притяжения.

Капельная модель ядра позволяет предсказать ряд важных и интересных результатов, подтверждаемых экспериментальными данными.

- Объем ядерной капли заполнен нуклонами, как капля жидкости молекулами. Поэтому объем ядра пропорционален количеству в нем нуклонов.
- Масса ядерной капли также пропорциональна числу нуклонов, поэтому все ядра имеют одинаковую объемную плотность нуклонов и одинаковую плотность ядерного вещества.
- Среднее расстояние между центрами двух рядом расположенных нуклонов также является постоянной величиной и не зависит от числа нуклонов в ядре.
- Капельная модель ядра позволяет получить полуэмпирическую формулу для расчета энергии связи атомного ядра.

В то же время имеется много ядерных явлений, которые капельная модель ядра объяснить не может, например влияние протон-нейтронной структуры на устойчивость ядер.

Применение квантовой механики к движению нуклонов в потенциальной яме дает теоретическое обоснование оболочечной модели ядра. Такая модель послужила основанием для разработки оболочечной модели нанокластера.

В оболочечной модели принимают, что нуклоны в ядре движутся по оболочкам в поле действия других нуклонов аналогично движению электронов в атомных оболочках. При возбуждении ядра один или несколько нуклонов переходят на возбужденные уровни. Последующие их переходы в основное состояние сопровождаются испусканием  $\gamma$ -квантов.

Оболочечная модель ядра в физическом отношении является более общей и универсальной по сравнению с капельной, к тому же позволяет объяснить ряд внутренних свойств ядра. В то же время нельзя упрощенно понимать физическую сущность оболочечной модели. Нуклонные оболочки не остаются неизменными — они постоянно находятся под влиянием нуклонов, не попавших в заполненную оболочку. Возникает весьма сложная внутриядерная картина, отдельные особенности которой могут быть описаны либо капельной, либо оболочечной моделями ядра. Поэтому обе взаимно дополняющие друг друга модели используют в теоретическом анализе ядерных явлений.

### 4.3. Моделирование в наноструктурной области

Основной проблемой моделирования является то, что ученые мало знают о фундаментальных закономерностях поведения отдельных частиц, структур и целых систем в нанометровом пространственном масштабе. Наночастицы одновременно и слишком малы (для непосредственного наблюдения и изучения), и слишком велики (для квантово-механических расчетов, которые в нанобласти оказываются весьма приближенными). Исследователи пока не умеют достаточно точно моделировать

поведение наночастиц, поскольку их характеристики непрерывно изменяются во времени и пространстве, а число объединяющихся в наносистемы частиц еще недостаточно велико, чтобы рассматривать эти системы в качестве статистических ансамблей. В связи с чем для поиска и создания эффективных функциональных и конструкционных наноматериалов и наноустройств предстоит значительно углубить фундаментальные представления о поведении наночастиц и разработать надежные методики расчета их свойств.

В методах расчета и анализа характеристик наносистем одной из главнейших является проблема масштабирования, которая, как показано на рис. 17, должна рассматриваться в трех различных аспектах или измерениях [5].

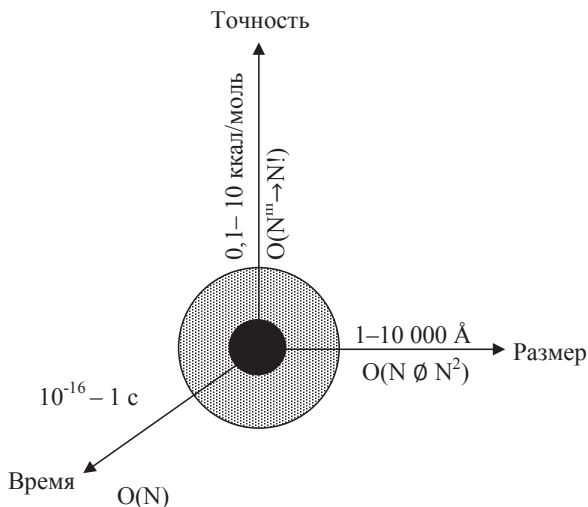


Рис. 17. Различные измерения масштабирования

1. Ось «Размер» представляет диапазон изменений масштаба в исследуемой области, а именно от размеров атома ( $\sim 1$  ангстрем) до максимальных размеров наночастиц ( $\sim 1$  мкм). При

этом если размер изучаемых объектов изменяется от 1 до 100 нм, то число содержащихся в них частиц меняется от  $10^2$  до  $10^{11}$ . Из-за малых размеров частиц сильно повышается роль поверхностных эффектов и взаимодействий с другими частицами или окружающей средой, что требует использования в соответствующих расчетах химических потенциалов.

2. Ось «Время» соответствует динамическому (временному) изменению масштаба событий. Хотя изменение масштаба по этой оси является линейным, однако сам диапазон изменения очень широк, так как время изучаемых процессов меняется на 15 порядков, от 1 фс ( $10^{-15}$  с) до 1 с. Наличие разнообразных временных масштабов вызывает необходимость учета как временных флуктуации частиц, так и неоднородности их распределения по размерам.

3. По оси «Точность» показаны соответствующие изменения точности расчетов и измерений. Ее повышение представляется необходимым условием как для разработки принципов конструирования материалов и понимания сущности протекающих в них явлений, так и для сокращения числа сложных и дорогостоящих экспериментов. Надежность моделирования связана также с разницей относительной точности параметров в различных временных и пространственных масштабах, что представляет собой весьма серьезную проблему.

На рис. 18 указаны экспериментальные и расчетные методы, используемые при изменениях временного и пространственно-го масштабов соответственно [5].

В табл. 2 приведен перечень основных кинетических методов и временной диапазон используемых для расчета динамики процессов.

Большая информация о свойствах наносистемы может быть получена в результате расчета ее полной энергии. В частности, стабильные конфигурации и структура, состояние равновесия наносистем обусловлены минимальным значением энергии. Производные полной энергии относительно координат ядер дают воз-

возможность найти частоту колебаний системы. С точки зрения наномеханики материалов квантово-механические расчеты энергии наносистемы имеют также большое значение, потому что позволяют определить различные механические свойства — структуру дефектов, наличие примесей, границы зерен и т. п. Кроме этого, электронные, оптические и магнитные свойства материалов тоже определяются равновесной конфигурацией атомной структуры.

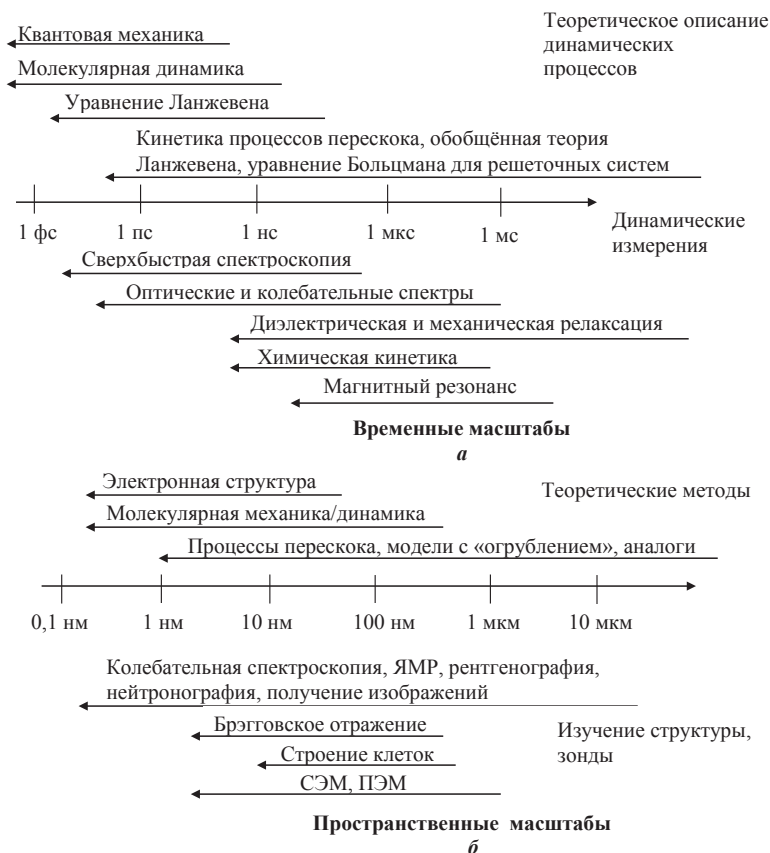


Рис. 18. Методы, используемые при изменениях временного — а и пространственного — б масштабов



Таблица 2

**Характерные времена использования методов моделирования  
кинетических физико-химических процессов**

№ п/п	Метод	Диапазон времени, с
1	Молекулярной динамики (МД)	$10^{-13} \div 10^{-7}$
2	Кинетический Монте–Карло (КМК)	$10^{-12} \div 1$
3	Броуновская динамика	$10^{-7} \div 10^{-5}$
4	Уравнение Больцмана (для газов, континуальное)	$10^{-8} \div 10^{-4}$
5	Уравнение Больцмана (дискретное)	$10^{-9} \div 1$
6	Модель решеточного газа (МРГ)	$10^{-12} \div 1$
7	Микроскопическая гидродинамика	$10^{-13} \div 10^{-5}$
8	Решеточные автоматы	$10^{-5} \div 1$
9	Гидродинамические уравнения	$10^{-5} \div 1$

Выбор того или иного метода моделирования наноструктур часто основан на компромиссном решении между надежностью, точностью и временем расчетов. В зависимости от количества исследуемых атомов в системе используют следующие методы моделирования (рис. 19):

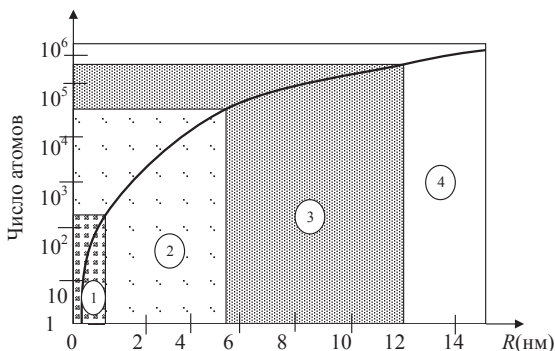


Рис. 19. Число атомов  $N$  в сферическом нанокристалле кремния в зависимости от его радиуса:

1 — расчеты «из первых принципов», 2 — полуэмпирические методы, 3 — метод сильной связи, 4 — методы молекулярной динамики

1. Поведение нескольких десятков и сотен атомов достаточно точно моделируется с использованием методов квантовой механики, основанных на методах Хартри–Фока и теории функционала плотности расчетов «из первых принципов», в которых моделирование связано с решением уравнения Шредингера для атомных систем (включающих ядра и электроны) и использованием числовых алгоритмов. Данные методы обеспечивают более точное описание поведения материалов на квантовом уровне, даже если размеры систем ограничены несколькими сотнями атомов. Однако их проведение требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому большое значение среди различных методов квантово-механического моделирования при ограниченных вычислительных ресурсах приобретают полуэмпирические подходы. Современные методы моделирования конденсированных сред, кластеров, нанотрубок и др., основанные на «первых принципах», базируются на строгих математических законах теории функционала плотности.

2. Для систем, содержащих от нескольких сотен до нескольких тысяч атомов, используют полуэмпирические методы, основанные на квантовой механике. Эффективность вычисления с использованием полуэмпирических методов основывается на том, что оператор Гамильтона квантовой системы может быть записан в параметрической форме. Разработан, в частности, обобщенный квантово-классический метод Кара–Парринелло, в котором классическая трактовка движения ядер, рассчитанного методами молекулярной динамики, сочетается с квантовым описанием движения электронов. При этом потенциальная энергия системы, необходимая для нахождения сил, действующих на атомы, выбирается не параметрически, а в процессе компьютерного моделирования. Этим методом построены модели жидких металлов и оксидов сравнительно небольших размеров (до ста атомов). Более широкое применение получил метод псевдопотенциалов, когда рассматривается поведение только валентных электронов и путем процедурных преобра-

зований снижается степень осцилляции их волновых функций вблизи ядра атома. На эмпирическом уровне значения псевдопотенциалов могут быть рассчитаны как функции взаимодействия атомов с небольшим числом параметров. Это позволяет лучше описать наноструктуру полупроводников.

3. Системы с несколькими десятками тысяч атомов наиболее эффективно моделируются с помощью одного из представительных методов, используемых в материаловедении, — метода сильной связи (МСС). Основой этого метода является применение линейной комбинации атомных орбиталей. МСС успешно развивается для исследования неорганических материалов, включая анализ взаимодействия между структурными и электронными свойствами полупроводников при наличии дефектов поверхности. Обычно при использовании МСС не всегда обеспечивается достаточная точность результатов, так как для каждого конкретного случая требуется свой выбор эмпирических параметров.

4. Сложные системы с большим количеством атомов, требующие огромные вычислительные мощности, исследуются методами молекулярной динамики и Монте—Карло. Основной их проблемой является проблема выбора потенциала межатомного взаимодействия. От этого во многом зависят результаты моделирования. Первоначально использовались простейшие потенциалы парного взаимодействия, а затем и многочастичные потенциалы. Как видно из рис. 19, при размерах наносистем больше 12 нм и числа атомов более  $10^5$  решающая роль при моделировании наносистем принадлежит методам молекулярной динамики. Однако для такого моделирования необходимо найти связующее звено между двумя иерархическими уровнями: атомной структурой и молекулярной динамикой.

Методы молекулярного моделирования наиболее четко разделяются по признаку наличия или отсутствия информации об электронных свойствах системы. Такая классификация отделяет классические модели от квантово-механических. Теории

более высокого уровня обычно дают возможность разработать методы для расчетов свойств, доступных теориям более низкого иерархического уровня. Если рассмотреть усовершенствованные методы Хартри—Фока, которые могут предсказать электронные переходы и геометрию возбужденного состояния, то их можно использовать и для высокоточных расчетов геометрии основного состояния молекул. Квантово-химические методы не только могут дать методику расчета геометрии динамики системы, что доступно также методам молекулярной механики, но и обеспечивают обоснование многих этих методов. Они оценивают параметры взаимодействий из расчетов по моделям «из первых принципов» и по теории функционала плотности.

Применительно к наномерным системам определяющей характеристикой моделирования, которое основано на представлении системы совокупностью молекул, является ограниченность области, в которой проводятся вычисления. Методы такого молекулярного моделирования оперируют главным образом самой «системой», пренебрегая «окружением», хотя в некоторых вариантах молекулярной теории изучается поведение молекул или ансамблей в средах. В случае отдельных молекул или дискретных кластеров взаимодействующих молекул молекулярные методы дают большое количество информации, включая относительные энергии связывания межмолекулярных взаимодействий. Если взаимодействие системы с окружением сравнительно слабое, то расчеты по этим методам могут хорошо согласовываться с экспериментом.

В молекулярной динамике взаимодействующие частицы рассматривают или как материальные точки, проявляющие свои потенциальные силы только при сближениях между собой, или как твердые сферы без внутренней структуры. Таким образом, предполагается, что внутреннее строение атомов и молекул не изменяется в процессе динамического моделирования. Однако каждый из атомов в пределах системы МД представляет сложный физический объект, который, развиваясь во времени,

может изменять свое внутреннее строение, обмениваясь энергией с окружающей средой. Более того, потенциалы усредненных межатомных сил, которые используют в молекулярной динамике, определяются фактически характеристиками атомных состояний и процессов.

Следует отметить, что размеры и временные рамки методов моделирования МД ограничены. Типичная область применения МД — системы, состоящие из нескольких миллионов атомов, в то время как наноустройства могут содержать миллиарды атомов. Поэтому интенсивно разрабатываются методы, расширяющие масштабные возможности моделирования, и создаются новые модели, представительные для наноразмерных систем.

5. К числу таких моделей можно отнести так называемый виртуальный атомный кластер (ВАК). Наличие слова «виртуальный» означает, что эта модель не соответствует физическому расположению атомов. ВАК представляет собой минимальный набор атомов, который формирует кластер, имеющий определенную плотность энергии. Главная особенность модели ВАК состоит в том, что атомное описание системы непосредственно входит в метод моделирования конечных элементов (КЭ), при этом вообще не используются такие понятия, как напряжение или нагрузка. Такой подход обеспечивает прямое прохождение информации между квантово-механическими характеристиками системы и методом конечных элементов, т. е. дает возможность описания системы в разных размерных шкалах путем введения новой переменной величины — так называемого параметра смещения. Модель ВАК дает возможность непосредственного рассмотрения энергии смещения или карты деформации вместо напряжения.

Для многих атомных систем существует возможность моделирования динамического развития как функции времени. Разработаны некоторые точные квантовые молекулярные динамические схемы, в которых межатомные силы вычисляются на каждом временном отрезке с помощью квантово-механиче-

ских вычислений в рамках приближения Борна—Оппенгеймера. Динамическое движение ионных позиций все еще подчиняется законам ньютоновской механики и описывается молекулярной динамикой. Наиболее широко известной и точной схемой является молекулярный динамический метод Кара—Парринелло, в котором электронные состояния и атомные силы описываются с помощью теории функционала плотности.

В заключение следует отметить, что расчетные методы наносистем находятся в процессе интенсивного развития, но, тем не менее, уже сейчас позволили предсказать ряд интересных результатов:

- С помощью полуэмпирических квантовых моделей установлено, что одни нехиральные углеродные нанотрубки  $(n, n)$  имеют металлический тип зонной структуры, а другие нехиральные нанотрубки  $(n, m)$ ,  $m \neq 0$ , являются металлами; в остальных случаях — полупроводниками.
- С помощью моделей молекулярной динамики проведен расчет движения в ряде наноустройств, сделана оценка прочности и устойчивости наноконструкций.

В последнее время в литературе постоянно появляются результаты большого числа исследований, связанных с созданием различных наносистем и наноустройств с применением средств компьютерного моделирования.

#### 4.4. Программное обеспечение моделирования наносистем

---

Программные средства создаются для моделирования материалов и процессов в следующих направлениях:

- Моделирование и исследование свойств супрамолекул.
- Моделирование и исследование свойств наночастиц.

- Моделирование микроструктуры с помощью плотной упаковки сфер.
- Моделирование микроструктуры с помощью плотной упаковки сферополиэдров.
- Моделирование пористой структуры наномембран.
- Моделирование процессов спекания.
- Моделирование самоорганизации наночастиц.
- Имитационное моделирование диффузионных процессов в мембранах.
- Имитационное моделирование оптического отклика на сорбцию в ансамбле наночастиц.
- Моделирование диффузионных и адсорбционных процессов.
- Моделирование оптического отклика вблизи сенсорного слоя.

В табл. 3 представлены коммерческие и некоммерческие продукты для моделирования наносистем.

Таблица 3

**Программные продукты для моделирования наносистем**

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
Расчеты «из первых принципов»			
1	ABINIT	Теория функционала плотности, псевдопотенциалы, базисы плоских волн	Расчет электронного спектра, пространственной структуры и макроскопических свойств различных систем, в том числе больших органических молекул и наночастиц
2	ADF	Теория функционала плотности	Расчет молекул в газовой фазе, растворенных молекул, периодических структур, главным образом кристаллов, полимеров и поверхностных слоев, теплогидравлические расчеты для жидкостей

Продолжение табл. 3

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
3	CFOUR	Теория возмущения Меллера–Плессе и метод связанных кластеров	Квантово-химические расчеты: точный расчет энергий и свойств атомов и молекул с учетом корреляции электронов
4	CRYSTAL	Ограниченный и неограниченный метод Хартри–Фока, теория функционала плотности и гибридные методы	Моделирование молекул, кристаллов и наноструктур
5	Dalton	Волновые функции SCF, MP2, MCSCF	Расчет магнитных и зависящих от частоты электрических свойств и поверхностей потенциальной энергии молекулярных систем как в статических, так и в динамических исследованиях
6	GAMESS	Метод самосогласованного поля. Теория возмущений, конфигурационное взаимодействие, связанные кластеры и функционал плотности	Расчет молекулярных волновых функций с учетом энергии электронной корреляции. Поиск переходных состояний с использованием аналитических градиентов; вычисление молекулярных свойств, электростатического потенциала, электронной и спиновой плотности.
7	Gaussian	Методы теории возмущений, связанных кластеров, конфигурационного взаимодействия, функционала плотности, метода самосогласованного поля	Позволяет предсказывать энергии, молекулярные структуры и колебательные частоты молекулярных систем, наряду со многими другими свойствами молекул. Возможен расчет энергии и оптимизация с аналитическими градиентами. Есть возможность моделирования сверхбольших молекулярных систем, в частности протеинов, благодаря методике разбиения молекул.



Продолжение табл. 3

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
8	Q-Chem	Усовершенствованные методы Хартри–Фока: конфигурационных взаимодействий, связанные кластеры, теория возмущений Меллера–Плессе	Позволяет решать широкий круг задач: молекулярные структуры, химические реакции, колебания молекул, ЯМР-спектры, процессы сольватации и др.
9	VASP	Псевдопотенциалы, методы расчета электронной зонной структуры PAW и базиса плоских волн.	Квантово-механические расчеты «из первых принципов» в области молекулярной динамики
10	WIEN2k	Теория функционала плотности. Метод линейаризованных присоединенных плоских волн полного потенциала и локальных орбиталей	Расчет электронных структур в твердых телах
Полуэмпирические методы			
11	AMPAC	SAM1, AM1, MND0, MND-O/d, PM3, MND-O/C и MIND0/3, PM6 и RM1. Метод сольватации AMSOL	Расчет электронной структуры молекул
12	МОРАС	RM1, PM6, MNDO, AM1 и PM3. Метод локализованных молекулярных орбиталей	Расчет электронной структуры основного и возбужденных состояний атомов, молекул и твердых тел. Исследование электронной структуры макромолекул (белков, ДНК, полимеров и твердых тел) и расчет больших биомолекул

Продолжение табл. 3

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
13	CHARMM	Квантовые модели и силовые поля в молекулярной механике	Молекулярное моделирование различных систем — от небольших молекул до сольватированных комплексов биологических макромолекул
14	COSMOS	Гибридные силовые поля и различные методы молекулярной динамики	Компьютерное моделирование молекулярных структур, в том числе кристаллических. Пакет также используется для расчетов спектров ЯМР и тензоров химического сдвига.
15	LAMMPS	Методы классической молекулярной динамики	Моделирование и расчеты полимеров, биомолекул, твердых веществ, а также крупнозернистых мезоскопических систем в атомном, мезоскопическом и континуальном масштабах.
16	Macro Model	Модели силовых полей	Расчет молекулярных систем, включая молекулярные конформации, движение молекул, межмолекулярные взаимодействия, в частности в системах лиганд–рецептор.
17	TINKER	Силовые поля: MM2, MM3, AMBER и др.	Оптимизация геометрии молекул, нахождение геометрии переходных состояний и т. д. Возможно моделирование больших биологических молекул.
Моделирование в молекулярной динамике. Интегрированные пакеты программ			
18	Chem3D	Расширенный метод Хюккеля. Силовые поля MM2, MMFF94	Моделирование молекулярных структур и графическая визуализация молекул и белков, участвующих в химических и биологических процессах.

Продолжение табл. 3

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
19	HyperChem	Расчеты «из первых принципов». Полуэмпирические методы. Методы моделирования молекулярной механики и динамики	Комплекс обладает развитыми средствами визуализации, которые могут использоваться как при подготовке входной информации (структуры молекулы), так и при анализе результатов. Позволяют в наглядной форме исследовать свойства биомолекул и их систем.
20	NWChem	Квантово-механические методы «из первых принципов», полуэмпирические методы, методы молекулярной механики и динамики, методы Монте–Карло.	Предназначен для расчетов как на высокопроизводительных параллельных суперкомпьютерах, так и для обычных кластеров рабочих станций.
21	SPARTAN	Методы молекулярной механики (силовые поля SYBYL и MMFF94); полуэмпирические методы квантовой химии (MNDO, AM1, RM1 и PM3)	Комплекс обладает развитыми графическими средствами GUI и имеет интерфейсы с другими программами.
22	Materials Studio	Полуэмпирические методы, методы расчета «из первых принципов» и молекулярной динамики.	Квантово-механические расчеты и компьютерное моделирование наноматериалов.

Окончание табл. 3

№ п/п	Название ПО	Реализуемые методы	Применение
23	<b>Atomistix Toolkit/Virtual NanoLab</b>	Квантово-химические методы моделирования, включая методы неравновесной функции Грина и теории функционала плотности	Моделирование различных атомных, молекулярных структур и наносистем, определение как их фундаментальных свойств (структура электронных уровней, концентрация носителей и др.), так и важнейших эксплуатационных свойств (электропроводность, оптические параметры и др.).

### Контрольные вопросы

1. Что такое многомасштабное моделирование материалов и процессов?
2. Какие трудности возникают при использовании компьютерного моделирования для наносистем?
3. На какие группы можно разделить методы многомасштабного моделирования?
4. Назовите три различных аспекта проблемы масштабирования в методах расчета и анализа характеристик наносистем.
5. Какие экспериментальные и расчетные методы используются в зависимости от изменений временного и пространственного масштабов?
6. При каких величинах наночастиц применимы полуэмпирические методы моделирования?
7. Какие основные программные продукты для моделирования наноразмерных структур вы знаете?

---

## Список литературы

---

1. Самарский, А. А. Математическое моделирование / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. — Москва : Наука. Физматлит, 1997. — 320 с.
2. Введение в математическое моделирование : уч. пособие / под ред. П. В. Трусова. — Москва : Университетская книга, Логос, 2007. — 440 с.
3. Пономарев, В. Б. Математическое моделирование технологических процессов : курс лекций / В. Б. Пономарев, А. Б. Лошкарев. — Екатеринбург : ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2006. — 129 с.
4. База знаний факультета информатики «Wiking». — Режим доступа: <http://mathmod.narod.ru/methods.htm#mm03>. — Загл. с экрана.
5. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. — Санкт-Петербург : Издательство «Лань», 2010. — 384 с.
6. Блехман, И. И. Прикладная математика: предмет, логика, особенности подходов, с примерами из механики : учебное пособие / И. И. Блехман, А. Д. Мышкис, Н. Г. Пановко. — Москва : УРСС, 2006. — 376 с.
7. Советов, Б. Я. Моделирование систем : учеб. для вузов / Б. Я. Советов, С. А. Яковлев. — Москва : Высш. шк., 2001. — 343 с.

8. Короткий, А. И. Математическое моделирование / А. И. Короткий, Л. Г. Гальперин. — Екатеринбург : Изд-во УГТУ-УПИ, 2005. — 102 с.
9. Боголюбов, А. Н. Основы математического моделирования : конспект лекций / А. Н. Боголюбов. — Москва : Физический факультет МГУ им. Ломоносова, 2001. — 180 с.
10. Пайерлс, Р. Построение физических моделей / Р. Пайерлс // УФН. — 1983. — № 6. — С. 32–37.
11. Горбань, А. Н. Демон Дарвина: Идея оптимальности и естественный отбор / А. Н. Горбань, Р. Г. Хлебопрос. — Москва : Наука, 1988. — 208 с.
12. Губарь, Ю. В. Введение в математическое программирование / Ю. В. Губарь. — Москва : Интернет-Университет информационных технологий, 2007. — 199 с.
13. Попов, Ю. П. Вычислительный эксперимент / Ю. П. Попов, А. А. Самарский. — Москва : Знание, 1983. — 64 с.
14. Самарский, А. А. Компьютеры, модели, вычислительный эксперимент / А. А. Самарский. — Москва : Наука, 1988. — 354 с.
15. Бахвалов, Н. С. Численные методы : уч. пособие / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. — Москва : Наука, 1987. — 600 с.
16. Мануйлов, В. Г. Разработка программного обеспечения на Паскале / В. Г. Мануйлов. — Москва : «ПРИОР», 1996. — 240 с.
17. Строгалев, В. П. Имитационное моделирование : учеб. пособие для вузов / В. П. Строгалев, И. О. Толкачева. — Москва : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2008. — 276 с.
18. Хемди А. Таха. Введение в исследование операций / Таха А. Хемди. — Москва : «Вильямс», 2007. — 912 с.
19. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло) / Н. П. Бусленко [и др.]. — Москва : ГИФМЛ, 1962. — 244 с.

20. Ермаков, С. М. Методы Монте–Карло и смежные вопросы / С. М. Ермаков. — Москва : Наука, 1971.
21. Гмурман, В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика : учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман. — Москва : «Высш. школа», 1977.
22. Линдемманн, О. Математические модели в химии : пер. с нем. / О. Линдемманн. — Москва : Химия, 1999.
23. Химические приложения топологии и теории графов / под ред. Р. Кинга. — Москва : Мир, 1987. — 560 с.
24. Ризниченко, Г. Ю. Лекции по математическим моделям в биологии : учебник / Г. Ю. Ризниченко. — Ижевск : НИ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. Ч. 1. — 232 с.
25. Гуртов, В. А. Радиационные процессы в структурах металл — диэлектрик — полупроводник : уч. пособие / В. А. Гуртов. — Петрозаводск, 1988. — 96 с.
26. Моделирование сверхпроводников на основе временных уравнений Гинзбурга–Ландау / К. С. Гришаков [и др.] // Известия вузов. Физика. — 2009. — Т. 52, — № 11. — С. 92–102.
27. Гольдштейн, Р. В. О моделировании механического поведения гетероструктур с «квантовыми точками» / Р. В. Гольдштейн, В. А. Городцов, П. С. Шушпанников // Известия вузов. Физика. — 2009. — Т. 52, — № 11. — С. 58–66.
28. Моисеев, С. Г. Оптические свойства композитной среды Максвелла–Гарнета с серебряными включениями несферической формы / С. Г. Моисеев // Известия вузов. Физика. — 2009. — Т. 52, — № 11. — С. 7–12.

Для заметок

---





*Учебное издание*

**Звонарев** Сергей Владимирович

**ОСНОВЫ  
МАТЕМАТИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Редактор Н. П. Кубыщенко  
Верстка О. П. Игнатъевой

Подписано в печать 07.03.2019. Формат 60×84/16.  
Бумага офсетная. Цифровая печать. Усл. печ. л. 6,51.  
Уч.-изд. л. 7,5. Тираж 40 экз. Заказ 68

Издательство Уральского университета  
Редакционно-издательский отдел ИПЦ УрФУ  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 5  
Тел.: +7 (343) 375-48-25, 375-46-85, 374-19-41  
E-mail: rio@urfu.ru

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре УрФУ  
620083, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4  
Тел.: +7 (343) 358-93-06, 350-58-20, 350-90-13  
Факс: +7 (343) 358-93-06  
<http://print.urfu.ru>



