

С.В. Звонарев

Основы математического моделирования

Лекция № 1. Понятия модель и моделирование

- Рассмотреть краткую характеристику дисциплины, ее цели, задачи, объем, содержание, порядок изучения материала, связь с другими дисциплинами учебного плана.
- Определить основные понятия: моделирование и модель.
- Изучить свойства моделей и формы их представления.
- Определить цели построения модели.
- Изучить классификацию моделей и типов моделирования.

- Краткая характеристика дисциплины, ее цели, задачи, объем, содержание, порядок изучения материала, связь с другими дисциплинами учебного плана. Форма контроля самостоятельной работы. Характеристика учебной литературы.
- Введение.
- Основные определения. Понятие моделирование и модель.
- Свойства моделей. Формы представления модели. Цели построения модели.
- Классификация моделей и моделирования.

КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения курса является научить студентов использовать методы математического моделирования для исследования различных физических, химических и биологических процессов.

Задачи дисциплины заключаются в формировании знаний по следующим направлениям:

- этапы моделирования и способы построения математических моделей;
- методы математического моделирования, а также их применение в физике, химии, биологии и т.д.;
- интерпретация и верификации результатов компьютерного моделирования;
- типовые математические модели в задачах механики жидкости, газа и плазмы;
- компьютерное моделирование структуры и физических свойств наноматериалов.

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	60
Аудиторные занятия	36
Лекции	18
Практические занятия	18
Самостоятельная работа	24
Итоговый контроль	Зачет

- Понятия модель и моделирование.
- Математические модели и их классификации.
- Имитационное моделирование.
- Построение математической модели. Вычислительный эксперимент.
- Расчеты «из первых принципов».
- Полуэмпирические методы. Молекулярные методы. Методы Монте-Карло.
- Модели кластерных систем.
- Многомасштабное моделирование материалов и процессов.

- Моделирование фрактальных агрегатов.
- Моделирование структуры и свойств 1-компонентных наночастиц.
- Моделирование структуры и свойств 2-компонентных наночастиц.
- Моделирование микроструктуры методом плотной упаковки сфер.
- Моделирование процесса спекания монослойных и многослойных структур.
- Моделирование самоорганизации наночастиц.
- Моделирование диффузии идеального газа через монослойную мембрану.
- Моделирование диффузии идеального газа через многослойную мембрану.
- Моделирование диффузии по фрактальному агрегату.

- Самарский, А.А. Математическое моделирование / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – М.: Наука. Физматлит, 1997.
- Тарасевич, Н.Н. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс / Н.Н. Тарасевич. – М.: Эдиториал УРСС, 2001.
- Введение в математическое моделирование: уч. Пособие / под редакцией П.В. Трусова. – М.: Университетская книга, Логос, 2007. – 440 с.
- Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем: учебное пособие / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. – Спб.: издательство «Лань», 2010. – 384 с.
- Краснощеков, П.С., Петров А.А. Принципы построения моделей / П.С. Краснощеков, А.А. Петров. – М.: МГУ, 1983. – 264 с.
- Попов, Ю.П., Вычислительный эксперимент / Ю.П. Попов, А.А. Самарский. – М.: Знание, 1983. – 64 с.
- Пытьев, Ю.П. Методы математического моделирования / Ю.П. Пытьев. – М.: Физматлит, 2004.

ВВЕДЕНИЕ

Этапы рождения 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.

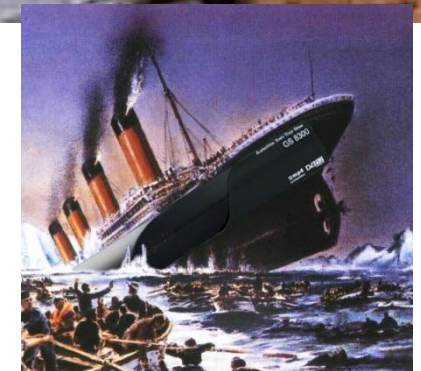
□ **Игры в детстве**



□ **Обучение в школе**



□ **Взрослая жизнь**



ПОНЯТИЕ «МОДЕЛЬ»

МОДЕЛЬ (франц. modèle, итал. modello, от лат. modulus — мера, мерило, образец, норма):

- **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.);
- **человек**, позирующий 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.

Модель – это такой материальный или мысленно представляемый объект, который в процессе познания замещает объект – оригинал, сохраняя некоторые важные его черты.

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

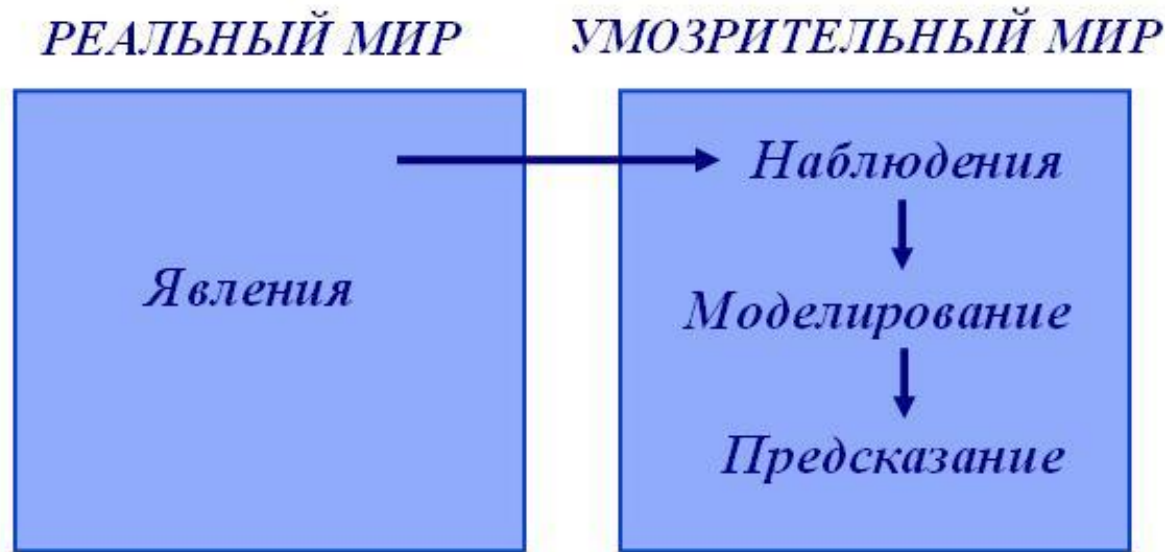
- *Адекватность.* Модель адекватна если результаты моделирования удовлетворяют исследователя и могут служить основой для прогнозирования поведения или свойств исследуемого объекта.
- *Простота.* При наличии нескольких моделей, позволяющих достичь желаемой цели и получить требуемые результаты с заданной точностью, предпочтение должно быть отдано более простой модели.
- *Потенциальность (предсказательность).* Возможность получения новых знаний об исследуемом объекте с помощью применения модели.
- *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.
- *Достаточная точность* результатов решения задачи, надежность функционирования модели.
- *Способность к совершенствованию* модели без ее коренной переделки.

Формы представления модели

- ◎ **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 подобии явлений, имеющих различную физическую природу, но описываемых одинаковыми математическими уравнениями.

ПОНЯТИЕ «МОДЕЛИРОВАНИЕ»

Что такое моделирование?



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.

Моделирование – метод научного ПОЗНАНИЯ

Моделирование не является расширением теории или эксперимента – его следует рассматривать как отдельную позицию между теорией и экспериментом. Более того, моделирование является новым видом получения научных знаний с некоторыми общими чертами, заимствованными из теории и эксперимента.

Моделирование (по А.А. Ляпунову) – это опосредованное практическое (**simulation**) или теоретическое (**modeling**) 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.

Классификация моделирования



Аналоговое моделирование — это моделирование по аналогии процессов в материальной среде. Оно используется для моделирования физических процессов, но одинаково

Интуитивное моделирование

Идеальным моделированием называется моделирование, при котором

Знаковое моделирование — это моделирование, использующее в качестве модели

Материальным моделированием принято называть моделирование, при котором реальному объекту противопоставляется увеличенная или уменьшенная копия, изученные свойства которой переносятся на объект при помощи теории подобия.

Мысленный образ
объекта, его
идеальная модель



Представление когнитивной
модели на
естественном
языке

Любое описание
объекта

Когнитивная модель

Позволяет ответить
на вопрос почему что-то
происходит

Содержательная
модель,
формулировка которой
используются понятия
и представления
предметных областей
знания, занимающихся
изучением объекта

Информационная модель — автоматизированные справочники, реализованные с помощью систем управления базами данных которой объект рассматривается как целостная система, которую расчленяют на отдельные элементы или подсистемы для объяснения и прогнозирования поведения объекта

Описывает будущее поведение объекта
Объект рассматривается как целостная система, которую расчленяют на отдельные элементы или подсистемы
используется для объяснения и прогнозирования поведения объекта

Описание объекта в терминах определений соответствующих предметных областей

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

Классификация по способу представления объекта

- ◎ **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.

- ◎ **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.
- ◎ **Аналоговые модели** основаны на подобии явлений, имеющих различную физическую природу, но описываемых одинаковыми математическими уравнениями. Примеры - 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.

- ◎ **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.

- Рассмотрена краткая характеристика дисциплины, ее цели, задачи, объем, содержание, порядок изучения материала, связь с другими дисциплинами учебного плана.
- Даны основные определения: понятие моделирование и модель.
- Описаны свойства моделей и формы их представления.
- Определены цели построения модели.
- Представлена классификация моделей и типов моделирования.

- Тарасевич, Н.Н. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс / Н.Н. Тарасевич. – М.: Эдиториал УРСС, 2001.
- Введение в математическое моделирование: уч. Пособие / под редакцией П. В. Трусова. – М.: Университетская книга, Логос, 2007. – 440 с.