

МІНІСТЕРСТВО ВНУТРІШНІХ ДІЛОВ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ВНУТРІШНІХ ДІВ

Балтовський О.О., Форос Г.В., Сіфоров О.І.

ОСНОВИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Навчальний посібник

Одеса 2023

Рекомендовано до друку науково-методичною радою Одеського державного університету внутрішніх справ

Авторський колектив:

Балтовський О.О. – доктор технічних наук, доцент, професор кафедри кібербезпеки та інформаційного забезпечення ОДУВС;

Форос Г.В. – кандидат юридичних наук, доцент, доцент кафедри кібербезпеки та інформаційного забезпечення ОДУВС;

Сіфоров О.М. – кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри кібербезпеки та інформаційного забезпечення ОДУВС

Рецензенти:

М.В. Корнієнко - доктор юридичних наук, професор, проректор Одеського державного університету внутрішніх справ;

Н.І. Логінова – кандидат педагогічних наук, доцент, завідувачка кафедри інформаційних технологій Національного університету «Юридична академія»

Балтовський О.О., Форос Г.В., Сіфоров О.І. Основи математичного моделювання/ За заг. ред. д.т.н., доц. О.А. Балтовського. Одеський держ. унів-т внутр. довідок, 2023. 125 с.

У навчальному посібнику розглянуто найважливіші теоретичні та практичні питання загальні принципи математичного моделювання, широко поширені в сучасних умовах, та повсюдно застосовні методи моделювання та побудови математичних моделей, обчислювальних алгоритмів та програм, що реалізують, наводяться приклади елементів математичного моделювання в біології. процесів Далі виписується загальна математична модель руху суцільних середовищ у вигляді інтегральних законів збереження, та обговорюються питання отримання з неї спеціальних моделей, що описують рух рідин, газів, деформованих тіл. Посібник розрахунків на здобувачів вищої освіти, вищих навчальних закладів спеціальності «Системний аналіз» може бути корисним викладачам, аспірантам та всім, хто цікавиться системним,

ISBN 978-5-7996-2576-4

УДК 001.891.573(075.8)

©О.А. Балтовський, Г.В. Форос, О.І. Сіфоров

ЗМІСТ

Вступ	5
1. Поняття «моделювання» та «модель»	7
1.1. Модель	7
1.2. Цілі побудови моделей	8
1.3. Властивості моделей	8
1.4. Форми представлення моделі	10
1.5. Моделювання	10
1.6. Класифікація моделювання	12
1.7. Класифікація моделей	13
Контрольні питання	15
2. Математичні моделі та їх класифікації	16
2.1. Математична модель	16
2.2. Узагальнена математична модель	16
2.3. Нелінійність математичних моделей	17
2.4. Ступінь відповідності математичної моделі об'єкту	18
2.5. Класифікація математичних моделей	18
Контрольні питання	25
3. Побудова математичної моделі та обчислювальний експеримент	26
3.1. Етапи побудови математичної моделі	26
3.2. Підходи до побудови математичних моделей	28
3.3. Обчислювальний експеримент	30
3.4. Імітаційне моделювання	35
3.5. Приклади математичних моделей у фізиці, хімії, біології	42
3.6. Методологія моделювання щодо пошуку оптимального рішення для інтелектуальних систем інформаційної підтримки	55
Контрольні питання	93
4. Багатомасштабне моделювання матеріалів та процесів	94
4.1. Види багатомасштабного моделювання	95
4.2. Багатомасштабне моделювання енергетичних процесів	97
4.3. Моделювання в наноструктурній галузі	99
4.4. Програмне забезпечення моделювання наносистем	105
4.5. Методологія подання багатовимірних функцій у вигляді таблиць та автоматизованої побудови графіків цих функцій з використанням ЕОМ	110
Контрольні питання	120
Висновки	122
Список літератури	124

ВСТУП

Суть методології математичного моделювання полягає у заміні вихідного об'єкта його чином — математичною моделлю та подальшому вивченні моделі, наприклад, за допомогою обчислювальних алгоритмів, що реалізуються на комп'ютерах. Цей метод пізнання поєднує в собі багато переваг теорії та експерименту. Робота не з самим об'єктом (явленням, процесом), а з його моделлю дає можливість безболісно, відносно швидко і без істотних витрат дослідити його властивості та поведінку в будь-яких мислимих ситуаціях (переваги теорії). У той же час експерименти з моделями об'єктів дозволяють за підтримки сучасної обчислювальної техніки та численних алгоритмів детально вивчати об'єкти в достатній повноті, недоступній суто теоретичним підходам (перевага експерименту). Методологія математичного моделювання бурхливо розвивається,

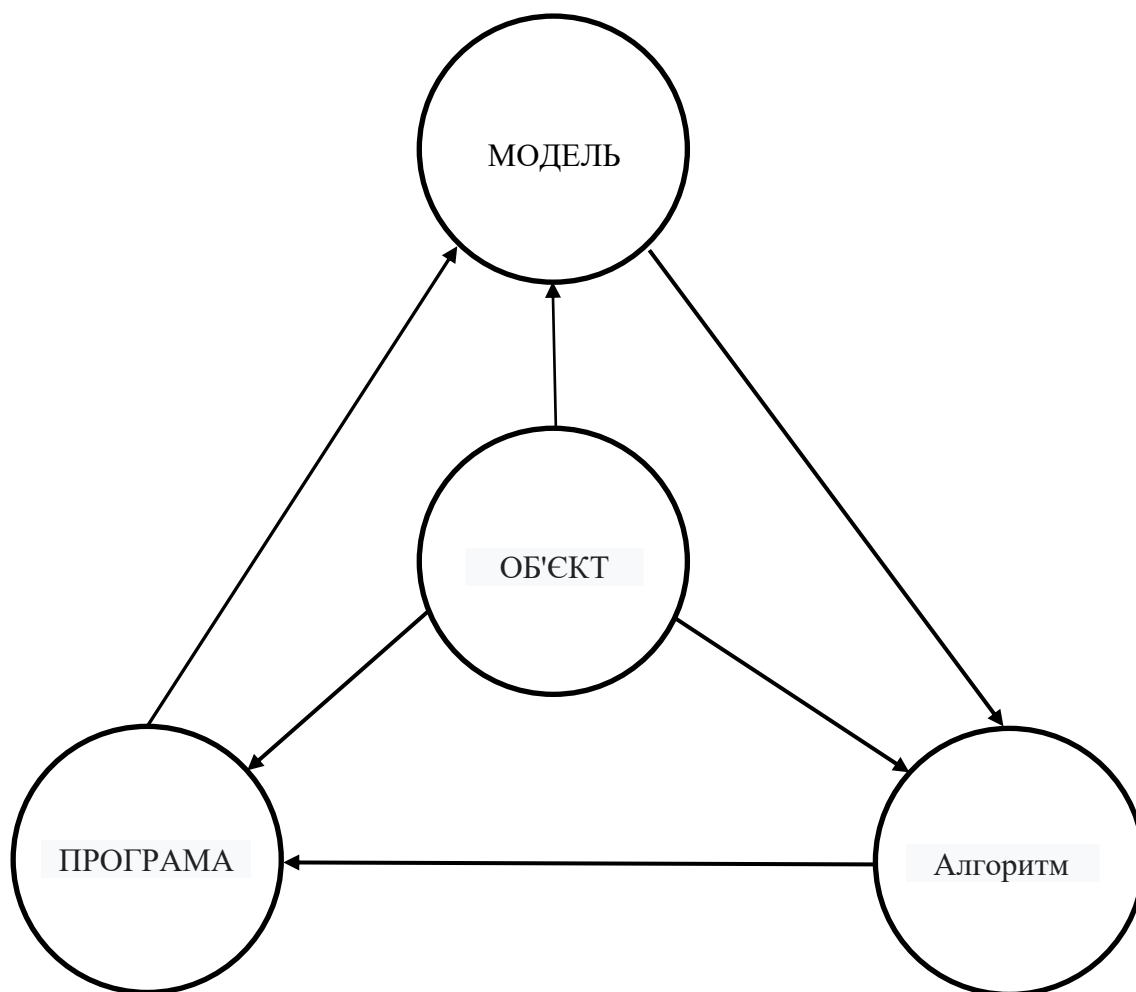
Елементи математичного моделювання використовувалися для початку точних наук, другий їх розвиток припав на кінець 40-х - початок 50-х років ХХ століття і був обумовлений принаймні двома причинами. Перша з них – поява ЕОМ, що розширило можливості досліджень. Друга — національні програми СРСР та США щодо створення нових видів вооружень, які не могли бути реалізовані традиційними методами. Математичне моделювання блискуче впоралося з цим завданням: ядерні вибухи, польоти ракет та супутників були попередньо здійснені за допомогою математичних моделей на ЕОМ.

Нині розпочинається третій етап розвитку математичного моделювання із залученням нових можливостей інформаційного суспільства. Без володіння інформаційними ресурсами не можна думати про вирішення важливих проблем, що стоять перед світовим співтовариством. Однак вихідна, «сиря» інформація часто мало що дає для аналізу та прогнозу, для прийняття рішень та контролю за їх виконанням. Потрібні надійні способи переробки такого інформаційного «сировини» на готовий «продукт», тобто на точні знання. Математичне моделювання може стати інтелектуальним ядром інформаційних технологій, всього процесу інформатизації суспільства.

Сама постановка питання про математичне моделювання будь-якого об'єкта породжує чіткий план дій. Його можна умовно розбити на три етапи: розробка моделі, вибір алгоритму, створення програми. На першому етапі вибирається (або будується) еквівалент об'єкта, що відображає у математичній формі його властивості - закони, яким він підпорядковується, зв'язки, притаманні його частинам, тощо. Математична модель (або її фрагменти) досліджується теоретичними методами що дозволяє отримати важливі попередні знання про об'єкт.

Інший етап – вибір (або розробка) алгоритму для реалізації моделі на комп'ютері. Модель представляється у формі, зручній для застосування чисельних методів, визначається послідовність обчислювальних та логічних операцій, які потрібно зробити, щоб знайти шукані величини із заданою точністю. Обчислювальні алгоритми повинні не спотворювати основні властивості моделі і, отже, вихідного об'єкта, бути економічними та

адаптованими до особливостей розв'язуваних завдань та використовуваних комп'ютерів.



Елементи математичного моделювання

На третьому етапі створюються програми, що «переводять» модель та алгоритм на доступну комп'ютеру мову. До них також висуваються вимоги економічності та адаптивності.

Створивши тріаду "модель-алгоритм-програма", дослідник отримує до рук універсальний, гнучкий та недорогий інструмент, який спочатку налагоджується, тестується у "пробних" обчислювальних експериментах. Після того як адекватність (достатня відповідність) тріади вихідному об'єкту засвідчена, з моделлю проводяться різноманітні та докладні «досліди», що дають всі необхідні якісні та кількісні властивості та характеристики об'єкта. Процес моделювання супроводжується поліпшенням та уточненням за необхідності всіх компонентів тріади.

Основною перешкодою для широкого використання математичного моделювання у науці, техніці, управлінні є нестача кваліфікованих фахівців. Вимоги, що висуваються до фахівця в галузі математичного моделювання, дуже високі і водночас суперечливі. З одного боку, він має бути професіоналом, який глибоко розуміє досить вузьку конкретну галузь

досліджень. З іншого боку, йому часто доводиться виступати як вченому, який бачить проблему загалом і здатний уточнити, а іноді й радикально змінити постановку завдання, запропоновану фізиками, хіміками чи біологами. Робота в галузі математичного моделювання передбачає своєрідний стиль мислення, в якому глибина та конкретність поєднуються з широтою та розумінням загальних ідей.

В основу цього посібника покладено навчальний матеріал основного курсу «Основи математичного моделювання».

У здобувачів вищої освіти є лише небагато пройдених курсів (математичного аналізу, алгебри, обчислювальних методів лінійної алгебри, інші вступні курси), тому ми постаралися викласти матеріал у формі, максимально доступній для цієї категорії здобувачів вищої освіти та одночасно спонукаючих до них і спеціальних курсів, оскільки вірна стратегія математичного моделювання різних об'єктів може бути намічена тільки при гарному уявленні про наявний інструментарій та основні досягнення у кожній із компонент згаданої вище тріади.

У посібнику викладаються основні принципи побудови математичних моделей, обчислювальних алгоритмів та програм, що їх реалізують, наводяться приклади елементів математичного моделювання в біології, економіці, управлінні. Далі виписується загальна математична модель руху суцільних середовищ у вигляді інтегральних законів збереження, та обговорюються питання отримання з неї спеціальних моделей, що описують рух рідин, газів, деформованих тіл. Для кращого засвоєння лекційного матеріалу деякі параграфи завершуються формулюванням питань, які потрібно вирішити під час зайняти. Список літератури не претендує на повноту. У ньому наведені найпростіші та найдоступніші джерела.

Практично у всіх сферах творчої діяльності застосовується моделювання, починаючи від дослідників і закінчуючи військовими начальниками. Математичне моделювання повинно забезпечуватися виконанням наступних вимог: чітке формулювання основних зрозуміти та припущень, що ґрунтується на досвіді (апостеріорній), аналіз адекватності використовуваних моделей, гарантована точність обчислювальних алгоритмів тощо, а також особливості використання існуючого математичного апарату до вивчення об'єктів.

1. ПОНЯТТЯ «МОДІЛЮВАННЯ» І «МОДЕЛЬ»

Можна виділити кілька етапів створення методології математичного моделювання:

- Поява точних наук. Методи обчислень носять імена таких корифеїв науки, як Ньютон і Ейлер, а слово «алгоритм» походить від імені середньовічного арабського вченого Аль Хорезмі. повтор

- Кінець 40-х-початок 50-х років XX століття:

- поява комп'ютерів;
- розробка ядерних технологій.

- Поява інформаційного суспільства. Методологія математичного моделювання стає інтелектуальним ядром інформаційних технологій.

У ранньому віці людина починає взаємодіяти із різними моделями. Гра по побудові конструкцій з кубиків є створенням деяких моделей. При навчанні поширене використання моделей у тій чи іншій формі. Для вивчення застосовуються різні схеми та таблиці, які є моделями, що відбивають властивості досліджуваного об'єкта. Підготовку тексту можна розглядати як моделювання певної події чи явища за допомогою рідної мови. На заняттях з точних наук також використовують макети реальних об'єктів, що вивчаються [2].

Слід зазначити, що у дорослій житті людина постійно стикається з моделями реальних об'єктів, процесів та явищ. При цьому для створення складних виробів потрібна робота колективів розробників. Як приклад можна навести великий адронний колайдер (де планується провести моделювання Великого вибуху, після якого, згідно з гіпотезою, виникла наша Всесвіт).

Інструментом математичного моделювання насамперед є математика. В даний час математичне моделювання застосовується у:

- традиційних галузях – фізика, хімія, біологія;
- нових галузях та дисциплінах — технічні, екологічні та економічні системи.

Складнощі:

- прямий натурний експеримент або небезпечний або неможливий;
- система існує в єдиному екземплярі;
- соціальні процеси

1.2. Модель

Що таке модель? Модель від латів. *modulus* – міра, мірило, зразок, норма). Під моделлю можна розуміти:

- зразок, який є еталоном (стандартом) для серійного або масового відтворення (модель автомобіля, модель одягу тощо), а також тип, марка якогось виробу, конструкції;

- виріб (виготовлений з дерева, глини, воску, гіпсу та ін.), з якого знімається форма для відтворення в іншому матеріалі (металі, гіпсі та ін.);

- людину, що позує художнику (натурник), і взагалі зображувані

об'єкти (натура);

- пристрій, що відтворює, імітує (зазвичай у зменшеному масштабі) будову та дію будь-якого іншого пристрою в наукових, практичних (наприклад, у виробничих випробуваннях) або спортивних цілях.

Перед тим, як запустити у виробництво новий літак, його перевіряють на міцність в аеродинамічній трубі – це модель. Щоб продемонструвати систему кровообігу, лектор звертається до намальованого плаката – це модель. На стіні виситиме картина Айвазовського "Дев'ятий вал" - це модель.

Під моделлю зазвичай розуміють матеріальний чи уявний уявлення об'єкт, який у процесі пізнання заміщає об'єкт — оригінал, зберігаючи деякі важливі його риси. Кожен процес, що вивчається, можна описати різними моделями, при цьому жодна модель не може зробити це абсолютно повно і всебічно. Однак використання спрощеної моделі, що відображає окремі риси досліджуваного об'єкта, дозволяє ясніше побачити взаємозв'язок причин і наслідків, входів і виходів, швидше зробити необхідні висновки, прийняти правильні рішення [3].

1.4. Цілі побудови моделей

Реальний об'єкт у порівнянні з моделлю складний для аналізу та менш інформативний. Слід зазначити, що дослідження безпосереднім чином більшості об'єктів і явищ неможливо. Так, експерименти з економікою країни чи зі здоров'ям її населення неможливі.

Серед цілей моделювання можна виділити такі [2]:

- зрозуміти, як улаштований конкретний об'єкт: яка його структура, внутрішні зв'язки, основні властивості, закони розвитку, саморозвитку та взаємодії з навколишнім світом;
- навчитися керувати об'єктом або процесом, визначити найкращі способи управління при заданих цілях та критеріях;
- прогнозувати прямі та непрямі наслідки реалізації заданих способів та форм впливів на об'єкт. Модель може бути представлена різним способом.

У широкому значенні модель визначають як відображення найістотніших властивостей об'єкта.

1.5. Властивості моделей

Основними вимогами до математичних моделей є вимоги адекватності, універсальності та економічності (рис. 1).

Адекватність. Модель вважається адекватною, якщо відбиває задані властивості з прийнятною точністю. Точність визначається як ступінь збігу значень вихідних параметрів моделі та об'єкта. Точність моделі різна в різних умовах функціонування об'єкта. Ці умови характеризуються зовнішніми параметрами. У просторі зовнішніх параметрів виділити область адекватності моделі, де помилка менша за задану гранично допустиму помилку. Визначення області адекватності моделей — складна процедура, яка потребує

великих обчислювальних витрат, які швидко зростають із збільшенням розмірності простору зовнішніх параметрів. Це завдання за обсягом може значно перевершувати задачу параметричної оптимізації самої моделі, тому для об'єктів, які знову проектуються, може не вирішуватися.

Універсальність. Визначається в основному числом та складом зовнішніх та вихідних параметрів, що враховуються у моделі.



Рис. 1. Властивості моделей

Економічність. Модель характеризується витратами обчислювальних ресурсів для її реалізації – витратами машинної години та пам'яті.

Простота. Модель, за якою бажаний результат досягається за ту саму годину з тією ж точністю при врахуванні меншої кількості факторів при розрахунку, називається простою.

Потенційність (передбачуваність). Можливість отримання нових знань про досліджуваний об'єкт за допомогою застосування моделі.

Достатня точність результатів розв'язання задачі, надійність функціонування моделі.

Здатність до удосконалення моделі без її докорінної переробки

Простота форм вихідних даних та їх заповнення при видачі завдання на розрахунок.

За допомогою моделі, що розробляється, вирішується широкий спектр

завдань.

Суперечливість вимог до моделі, володіти широкою областю адекватності, високою ступенем універсальності та високою економічністю зумовлює використання ряду моделей для об'єктів одного й того самого типу.

1.4. Форми представлення моделі

Серед форм представлення моделей можна назвати такі [4]:

- інваріантна - запис співвідношень моделі за допомогою традиційної математичної мови безвідносно до методу розв'язання рівнянь моделі;
- аналітична - запис моделі у вигляді результату аналітичного рішення вихідних рівнянь моделі;
- алгоритмічна - запис співвідношень моделі та обраного чисельного методу рішення у формі алгоритму;
- схемна (графічна) — представлення моделі деякою графічною мовою (наприклад, мова графів, еквівалентні схеми, діаграми тощо);
- фізична - представлення моделей як зменшених копій реальних апаратів та технологічних процесів;
- аналогова - моделі, засновані на подібі явищ, що мають різну фізичну природу, але описуються однаковими математичними рівняннями.

1.5. Моделювання

У міру того, як якась наука стає більш точною, у ній у дедалі більших масштабах застосовується математичний опис досліджуваних об'єктів та явищ. Зокрема, цей принцип давно застосовується у багатьох галузях фізики. Однак це не завжди знаходить розуміння серед фахівців у галузі нанотехнології через відсутність досвіду математичного моделювання наносистем.

Щоб уникнути марного конструювання та збирання чисельних дорогих прототипів наносистем, потрібно спочатку детально розробити структуру та технологію збирання нанооб'єкта чи молекулярного кластера. Для цього використовують методи комп'ютерного моделювання. За допомогою моделювання, заснованого на великій кількості експериментальної інформації, можна описати поведінку проєктованих наносистем. Крім того, комп'ютерне моделювання в ряді випадків є каталізатором для експериментальних досліджень та виробництва. Останнім часом розширюється круг завдань, під час вирішення яких застосовується комп'ютерне моделювання. Якщо в минулому моделювання, зокрема комп'ютерне, було спрямоване на кількісний опис процесів у матеріалах,

Розглядаючи елементарну картину загального методу пізнання світу (див. рис. 2), можна ідентифікувати реальний та умоглядний світ. У реальному світі спостерігають різні явища та процеси, що відбуваються як у природній, так і в техногенній среде. Умоглядний світ - це світ розуму, що описує уявлення людей про реальний світ за допомогою спостереження, моделювання

та передбачення.

При моделюванні використовуються моделі трьох типів:

- описують поведінку об'єктів чи результати спостережень явищами;
- що пояснюють причину такого поведінки та отримання таких результатів;
- що дозволяють передбачити поведінку та результати в майбутньому.

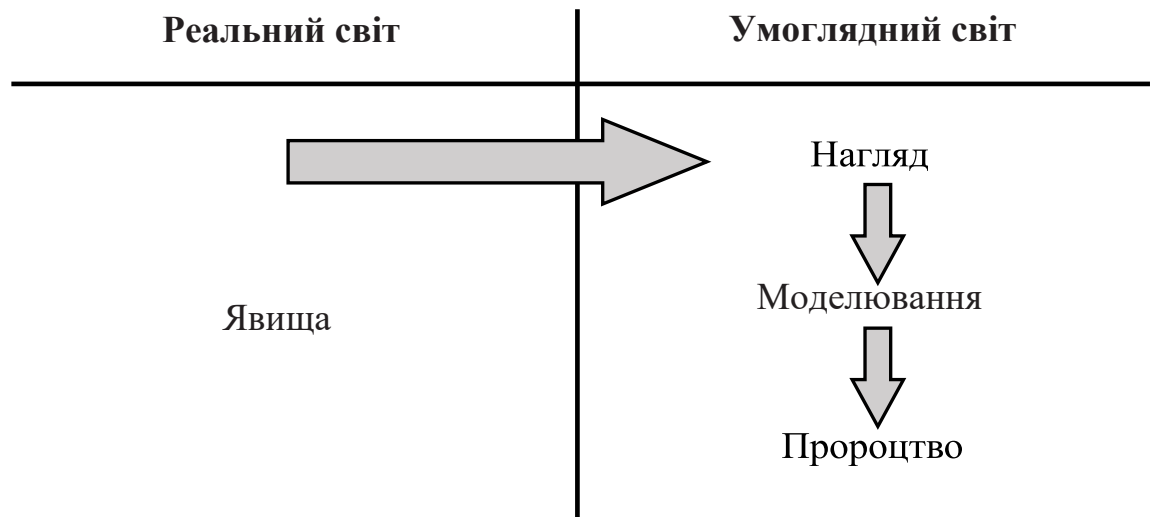


Рис. 2. Елементарний опис загального способу пізнання

Моделювання є одним із методів пізнання, вивченням яких займається спеціальна галузь знань — методологія.

Моделювання- це особливий метод пізнання навколишнього світу, який відноситься до загальнонаукових методів. Він може застосовуватися як у емпіричному, так і на теоретичному рівнях. В англійській мові для поняття моделювання існує два терміни: modeling та simulation. Перший означає моделювання, що ґрунтується головним чином на теоретичних положеннях, а друге — відтворення, імітацію стану системи на основі аналізу її поведінки (імітаційне моделювання) [5].

Поняття моделювання, на думку [6] визначається як опосередковане практичне або теоретичне дослідження об'єкта, при якому безпосередньо вивчається не сам об'єкт, що цікавить нас, а деяка допоміжна штучна або природна система (модель):

- яка знаходиться у деякій об'єктивній відповідності до об'єкта, що пізнається;
- здатна замінювати його в певних відносинах;
- дає при її дослідженні, в кінцевому рахунку, інформацію про моделюється об'єкт.

Моделювання не є розширенням теорії чи експерименту – його слід розглядати як окрему позицію між теорією та експериментом. Більше того, моделювання є новим видом здобуття наукових знань з деякими загальними рисами, запозиченими з теорії та експерименту.

1.8. Класифікація моделювання

Велика кількість типів моделювання та їх постійна зміна не дозволяють створити логічно закінчену класифікацію. В даний час моделювання можна умовно розділити на матеріальне чи фізичне моделювання та ідеальне моделювання (див. рис. 3).

Матеріальним (фізичним) моделюванням прийнято називати моделювання, в якому реальному об'єкту протиставляється збільшена чи зменшена копія, вивчені властивості якої переносяться об'єкт за допомогою теорії подоби.

При матеріальному моделюванні дослідження об'єкта відбувається за його відтворення в іншому масштабі. Тут можливе кількісне перенесення результатів експерименту з моделі на оригінал. Однак для аналізу складних об'єктів та процесів, якими є більшість електронних схем, конструкцій та технологічних процесів виробництва радіоелектронної техніки, приладобудування, машинобудування та інших промислових галузей, застосування матеріального моделювання важко, оскільки доводиться використовувати велику кількість критеріїв та обмежень, які можуть бути несумісні, а найчастіше і нездійсненні.

Реальність	
<i>Матеріальне (фізичне) моделювання</i>	<i>Ідеальне моделювання</i>

Рис. 3. Види моделювання

Ідеальним моделюванням називається моделювання, в якому реальному об'єкту протиставляється опис їх у вигляді мови, графіки, таблиць, математичних формул, розрахунків. Головна відмінність ідеального моделювання від матеріального полягає в тому, що воно засноване не на матеріалізованій аналогії об'єкта та моделі, а на аналогії ідеальної, мислимої і завжди має теоретичний характер.

Натурне та аналогове моделювання є складовими матеріального моделювання (рис. 4).

Матеріальне моделювання	
<i>Натурне моделювання</i>	<i>Аналогове моделювання</i>

Рис. 4. Види матеріального моделювання

Натурне моделювання— моделювання, при якому реальному об'єкту ставиться у відповідність його збільшень або зменшення матеріальний аналог, що допускає дослідження за допомогою подальшого перенесення властивостей процесів, що вивчаються, та явищ з моделі на об'єкт на основі

теорії подібності. Як приклад натурного моделювання можна навести випробування нового автомобіля чи літака в аеродинамічній трубі.

Аналогове моделювання— моделювання, засноване на аналогії процесів і явищ, що мають різну фізичну природу, але формально, що однаково описуються.

Ідеальне моделювання можна поділити на такі типи: інтуїтивне, знакове та наукове (рис. 5).

Ідеальне моделювання		
<i>Інтуїтивне моделювання</i>	<i>Наукове моделювання</i>	<i>Знакове моделювання</i>

Рис. 5. Види ідеального моделювання

Інтуїтивне моделювання— моделювання, засноване на інтуїтивному уявленні про об'єкт дослідження, що не піддається формалізації, або не потребує її.

Наукове моделювання— завжди логічно обґрунтоване моделювання, що використовує мінімальну кількість припущень, прийнятих як гіпотези на підставі спостережень за об'єктом моделювання.

Наприклад, інтуїтивної моделі можна зарахувати життєвий досвід людини з лікування захворювань за допомогою методів народної медицини.

Знакове моделювання— моделювання, що використовує як моделі знакові зображення будь-якого виду: схеми, графіки тощо.

Прикладом знакового моделювання є ноти музичних творів, хімічні формули тощо.

1.9. Класифікація моделей

Можна навести таку класифікацію моделей (див. рис. 6) [2]. При аналізі поведінки об'єкта-оригіналу формується його образ або ідеальна модель, яка називається когнітивною.

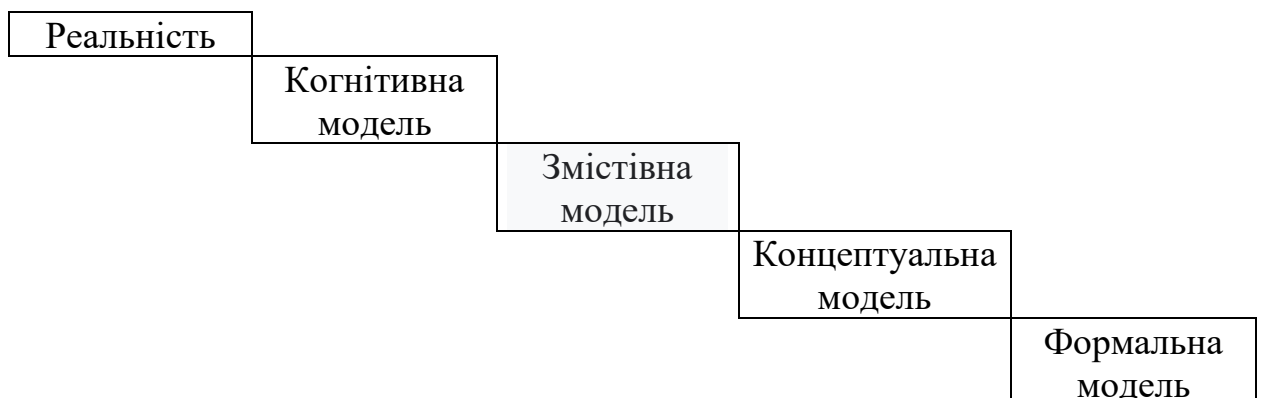


Рис. 6. Взаємовплив рівнів моделювання

Подання когнітивної моделі на природній мові називають змістовною моделью. Залежно від цілей моделі класифікуються на описові, пояснювальні та прогностичні [2].

Описовою моделлю можна назвати будь-яке опис об'єкта.

Пояснювальна модель має забезпечити пояснення причин перебування системи у поточному стані.

Прогностична модель має забезпечувати розуміння поведінки об'єкта у майбутньому.

Концептуальна модель прийнято називати змістовну модель, при формулюванні якої використовуються поняття та уявлення предметних галузей знання, що займаються вивченням об'єкта моделювання.

Виділяють три види концептуальних моделей: логіко-семантичні, структурно-функціональні та причинно-наслідкові.

Логіко-семантична модель- модель з описом об'єкта у термінах та визначеннях відповідних предметних областей.

Структурно-функціональна модель- модель розгляду об'єкта як єдиного цілого, з подальшим вивченням його окремих елементів чи підсистем.

Причинно-наслідкова модель- модель, що застосовується для пояснення та прогнозування поведінки об'єкта.

Формальна модель є представленням концептуальної моделі за допомогою однієї чи кількох формальних мов.

Інформаційна модель- модель, що містить автоматизовані довідники, реалізовані за допомогою систем керування базами даних.

Формальна класифікація моделей ґрунтується на класифікації використовуваних математичних засобів [7]. Часто будується у формі дихотомій (розподіл на дві частини). Наприклад, один із популярних наборів дихотомій:

- лінійні чи нелінійні моделі;
- зосереджені чи розподілені системи;
- детерміновані чи стохастичні;
- статичні чи динамічні;
- дискретні чи безперервні тощо.

Кожна побудована модель є лінійною чи нелінійною, детермінованою чи стохастичною. Природно, що можливі та змішані типи: в одному відношенні зосереджені (у частині параметрів), в іншому – розподілені моделі тощо.

Класифікація за способом подання об'єкта.

Поряд із формальною класифікацією моделі відрізняються за способом представлення об'єкта:

- структурні;
- функціональні.

Структурні моделі представляти об'єкт як систему зі своїм пристроєм та механізмом функціонування.

Функціональні моделі не використовують таких уявлень і відображають

лише ззовні сприймається поведення (функціонування) об'єкта. У їхньому граничному вираженні вони називаються також моделями «чорної скриньки». Можливі також комбіновані типи моделей, які іноді називають моделями сірої скриньки.

Моделі, що заміщають технологічний об'єкт, залежно від типу образу поділяють на три види: абстрактні, аналогові та фізичні.

Анотація моделі ґрунтуються на можливості опису технічного об'єкта (системи) мовою символів, прийнятою у тій чи іншій галузі науки шляхом відволікання від неіснуючих ознак. Абстрактні моделі можуть бути математичними та нематематичними. Процес дослідження технічного об'єкта за допомогою абстрактної моделі включає три етапи:

- побудова описової моделі процесу, яка має відповідати на запитання «що відбувається», «чому так відбувається», «за яких умов це можливо», «що може статися за зміни даних параметрів та зовнішніх умов»;
- запис інформативної моделі за допомогою певної системи символів;
- дослідження функціонування створеної абстрактної моделі різними методами аналізу, більшість з яких спирається на математичний аналіз.

Аналогові моделі засновані на подібності явищ, що мають різну фізичну природу, але описуються однаковими математичними рівняннями. Подібність математичного опису цих процесів дозволяє експериментально та теоретично підтверджувати результати, отримані в одній галузі, відповідними результатами іншої. Прикладами аналогових моделей можуть бути електричні та механічні коливання.

Фізичні моделі мають ту ж фізичну природу, що й досліджуваний об'єкт і застосовуються в тих випадках, коли важко провести випробування реальних об'єктів у реальних умовах. У хімічній технології застосовують фізичні моделі – зменшені копії реальних апаратів та технологічних процесів (розрізняють лабораторні установки та так звані пілотні). При використанні результатів необхідно враховувати ефект масштабування.

Контрольні питання та завдання

1. Що таке модель та моделювання?
2. Назвіть цілі моделювання.
3. Які види моделювання?
4. Перелічіть властивості моделей.
5. Які форми представлення моделей вам відомі?
6. Назвіть відмінність ідеального моделювання від матеріального.
7. Що таке когнітивна модель?
8. Які моделі називають змістовними?
9. Назвіть різновиди змістовних моделей.
10. Чим концептуальна модель відрізняється від змістовної?
11. Які види концептуальних моделей ви знаєте?
12. За якими класифікаційними ознаками можна розділяти моделі?
13. Які моделі, залежно від способу представлення об'єкта, ви знаєте?

2. МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА ЇХ КЛАСИФІКАЦІЇ

2.1. Математична модель

Поняття «математичне моделювання» в останні кілька десятиліть є досить поширеним у науковій літературі, зокрема, у природно-технічній. В даний час практично на будь-якому проектному чи конструкторському підприємстві застосовуються математичні моделі. В останні роки широкого поширення набуло застосування математичного моделювання у наукових дослідженнях, особливо в таких галузях, як економіка, управління, історія, біологія та ін.

Математичною моделлю називається сукупність рівнянь або інших математичних співвідношень, що відображають основні властивості об'єкта, що вивчається, або явища в рамках прийнятої умоглядної фізичної моделі та особливості його взаємодії з навколишнім середовищем на просторово-часових межах області його локалізації. Математичні моделі різних процесів у континуальних системах будуються, як правило, мовою диференціальних рівнянь, що дозволяють точно описати стан процесу у будь-якій точці простору у довільну годину. Основними властивостями математичних моделей є адекватність і простота, що вказують на ступінь відповідності моделі об'єкту, що вивчається, та можливості її реалізації. Процес формулювання математичної моделі називається постановкою завдання [8].

Під математичним моделюванням можна розуміти процес побудови та вивчення математичних моделей. Розгорнуте визначення дано в роботі [2]: математичне моделювання — це ідеальне наукове знакове формальне моделювання, в якому опис об'єкта є мовою математики, а дослідження моделі з використанням тих чи інших математичних методів.

2.2. Узагальнена математична модель

Математична модель описує залежність між вихідними даними та шуканими величинами [4].

Елементами узагальненої математичної моделі є (див. рис. 7):

- множина вхідних даних (змінні) X, Y ; X - сукупність змінних, що варіюються; Y - незалежні змінні (константи);
- математичний оператор L , що визначає операції над цими даними, під яким розуміється повна система математичних операцій, що описують чисельні чи логічні співвідношення між множинами вхідних та вихідних даних (змінні);
- множина вихідних даних (змінних) $G(X, Y)$; є сукупність критеріальних функцій, що включає (за потреби) цільову функцію.

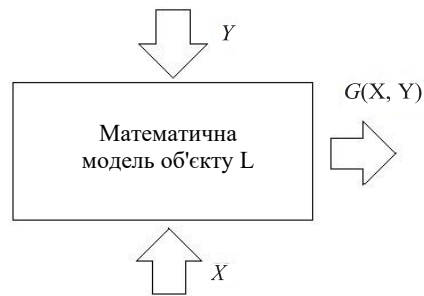


Рис. 7. Узагальнена математична модель

Математична модель є математичним аналогом проєктованого об'єкта. Ступінь адекватності її об'єкту визначається постановкою та коректністю вирішенням задачі проєктування.

Множина параметрів, що варіюються (змінних) X утворює простір параметрів, що варіюються, R_x (простір пошуку), яке є метричним з розмірністю n , що дорівнює кількості варіюються параметрів.

Безліч незалежних змінних Y утворюють метричний простір вхідних даних R_y . У тому випадку, коли кожен компонент простору R_y визначається діапазоном можливих значень, безліч незалежних змінних відображається деяким обмеженим підпростором простору R_y .

Безліч незалежних змінних Y визначає середовище функціонування об'єкта, тобто зовнішні умови, в яких буде працювати проєктований об'єкт.

Це можуть бути:

- технічні параметри об'єкта, які не підлягають зміні в процесі проєктування;
- фізичні обурення середовища, з яким взаємодіє об'єкт проєктування;
- тактичні параметри, які мають досягати об'єкта проєктування.

2.3. Нелінійність математичних моделей

Вихідні дані узагальненої моделі утворюють метричний простір критеріальних показників R_G .

Простота моделей багато в чому пов'язана з їхньою лінійністю. З погляду математики це відповідає принципу суперпозиції, у якому будь-яка лінійна комбінація рішень своєю чергою теж є рішенням шуканої задачі. Користуючись принципом суперпозиції, можна, знайшовши рішення у будь-якому окремому випадку, побудувати рішення у більш спільній ситуації. У цьому про закономірності загального випадку робиться висновок з урахуванням властивостей частки. Для лінійних моделей відгук об'єкта зміну якихось умов пропорційний величині цієї зміни.

У разі відсутності виконання принципу суперпозиції для математичних моделей знання щодо поведінки частини об'єкта нелінійного явища не дає інформації про поведінку всього об'єкта в цілому. Більшість реальних процесів та відповідних їм математичних моделей не лінійні. Лінійні моделі є наближенням реального об'єкта і вирішують лише окремі випадки. Так,

нелінійними стають моделі популяцій з урахуванням обмеження доступних ресурсів [1].

2.4. Ступінь відповідності математичної моделі об'єкту

Математична модель ніколи не буває тотожна об'єкту, що розглядається, і не передає всіх його властивостей та особливостей. Вона є лише наближеним описом об'єкта і має завжди наближений характер. Точність відповідності визначається ступенем відповідності адекватності моделі та об'єкта.

При побудові математичної моделі доводиться висувати додаткові припущення – гіпотези. Модель тому ще називають гіпотетичною. Основним критерієм застосування моделі є експеримент. Критерій практики дозволяє порівнювати гіпотетичні моделі та вибирати з них найбільш підходящу.

Кожен об'єкт описується обмеженою кількістю моделей чи їх систем. Процес моделювання значно легше реалізується під час використання уніфікації математичних моделей, тобто використання наборів готових моделей. Існує можливість перенесення готових моделей з одних на інші, ідентичні, аналогічні. Аналогічними називають об'єкти та процеси, що описуються однаковими за формою рівняннями, що містять різні фізичні величини та параметри, пов'язані між собою однаковими операторами. Величини, які в аналогічних рівняннях стоять на однакових місцях, називають аналогами.

Математична модель описує реальний об'єкт із якимось наближенням. Ступінь відповідності опису реального процесу визначається повнотою обліку обурювальних впливів. За відсутності чи незначності збурень, що діють як усередині, так і поза об'єктом, можна однозначно визначити вплив вхідних та керуючих параметрів на вихідні.

2.5. Класифікація математичних моделей

В даний час існує безліч моделей різного типу, які отримали розвиток у результаті застосування методів математичного моделювання у різних галузях. У зв'язку з цим виникає потреба у певній класифікації існуючих та математичних моделей, що з'являються [2–3, 9]. Існують такі види класифікацій математичних моделей залежно від:

- складності об'єкта моделювання;
- оператора моделі;
- вхідних та вихідних параметрів;
- цілі моделювання;
- способу дослідження моделі;
- об'єктів дослідження;
- приналежності моделі до ієрархічного рівня опису об'єкта;
- характеру властивостей, що відображаються;
- порядок розрахунку;
- використання управління процесом

За складністю об'єкта дослідження моделі поділяються на прості та досліджувальні об'єкти-системи (рис. 8). У простих моделях внутрішню будову об'єкта не розглядається і складові його елементи та підпроцеси не враховуються. Об'єкт-система є сукупністю взаємопов'язаних елементів, які взаємодіють з навколишнім середовищем як з єдиним цілим.

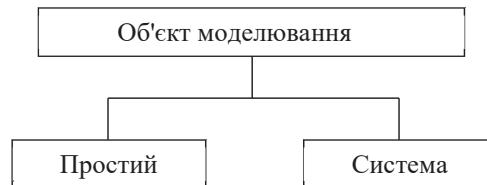


Рис. 8. Класифікація математичних моделей за складністю об'єкту

Залежно від оператора моделі вони поділяються на лінійні, нелінійні, алгоритмічні, прості та складні (див. рис. 9). За наявності лінійної залежності вихідних параметрів від вхідних математична модель називається лінійною, відповідно в разі нелінійної залежності модель — нелінійна. При забезпеченні оператором моделі функціональної залежності вихідних параметрів від вхідних у вигляді алгебри виразу модель є простою. Модель, що включає системи диференціальних та інтегральних співвідношень, називається складною. У разі побудови імітатора моделі поведінки об'єкта за допомогою алгоритму його називають оператором моделі. При цьому сама модель є алгоритмічною.



Рис. 9. Класифікація математичних моделей залежно від оператора моделі

Класифікація математичних моделей залежно від вхідних та вихідних параметрів представлена на рис. 10.

За характером модельованого процесу моделі поділяються на:

- детерміновані, які відповідають детермінованим процесам, що мають строго однозначний зв'язок між фізичними величинами, що характеризують стан системи у якийсь час; детермінована модель дозволяє однозначно обчислити та передбачити значення вихідних величин за значеннями вхідних параметрів та керуючих впливів;

- невизначені, які виходять з того, що зміна визначальних величин відбувається випадковим чином і значення вихідних величин перебувають у ймовірності відповідно до вхідних величин і не визначаються однозначно.



Рис. 10. Класифікація математичних моделей залежно від вхідних та вихідних параметрів

Моделі з невизначеними параметрами можна розділити на такі групи [2]:

- Стохастичні значення всіх чи окремих параметрів моделі визначаються випадковими величинами, заданими щільністю ймовірності.
- Випадкові значення всіх або окремих параметрів моделі визначаються випадковими величинами, що залежать від оцінки щільності ймовірності, що визначається в результаті обробки обмеженої експериментальної вибірки даних параметрів.

Інтервальні – значення всіх або окремих параметрів моделі описуються інтервальними величинами, заданим інтервалом, утвореним мінімальними та максимально можливими значеннями параметра.

- Нечіткі – значення всіх або окремих параметрів моделі описуються функціями приналежності відповідній нечіткій множині.

Моделі по відношенню до розмірності простору класифікуються на одновимірні, двовимірні та тривимірні. Такий поділ застосовується для моделей, що мають як параметри координати простору.

По відношенню до години моделі ділять на динамічні та статичні. Деякі характеристики моделей є незмінними, тобто не змінюють своїх значень протягом години, а деякі змінюються за певними законами. Якщо стан системи

змінюється з часом, то моделі називають динамічними, інакше статичними. Статичне моделювання слугуватиме для опису стану об'єкта у фіксований час, а динамічний — на дослідження об'єкта у годині.

Поділ моделей на якісні та кількісні, дискретні та неперервні, а також на змішані відбувається в залежності від виду використовуваних безлічі параметрів моделі.

З метою моделювання моделі діляться на описові, оптимізаційні та управлінські (див. рис. 11).

Серед цілей описових моделей можна назвати встановлення законів зміни параметрів моделі. Прикладом цієї моделі є модель руху ракети після запуску. За допомогою оптимізаційних моделей можна розраховувати оптимальні критерії параметрів моделювання. З іншого боку, ці моделі можуть застосовуватися для пошуку оптимального режиму управління процесом. До оптимізаційних моделей можна віднести модель ракети попередньої моделі з метою підйому на потрібну висоту за обмежену годину.

Цілі моделювання		
Описові	Оптимізаційні	Управлінські

Рис. 11. Класифікація математичних моделей залежно від цілей моделювання

З метою прийняття ефективних управлінських рішень у сферах життєдіяльності людини застосовуються управлінські моделі.

Залежно від методу реалізації моделі ділять на аналітичні, якщо можливо отримати вихідні параметри у вигляді аналітичних виразів, та на алгоритмічні, що дозволяють отримати лише приближені значення параметрів, що є предметом пошуку (рис. 12).

Методи реалізації моделі			
Аналітичні		Алгоритмічні	
Алгебраїчні	Наближені	Чисельні	Імітаційні

Рис. 12. Класифікація математичних моделей залежно від методу реалізації моделі

За об'єктами дослідження математичні моделі класифікують на:

- об'єкти з високим ступенем інформації, якщо в процесі моделювання відомі повні системи рівнянь, що описують всі сторони моделюється процесу і всі числові значення параметрів цих рівнянь;
- об'єкти з нульовим рівнем інформації; математична модель такого об'єкта будується з урахуванням статистичних експериментальних даних;
- об'єкти із відомими основними закономірностями; значення констант у математичних рівняннях опису моделі

встановлюють із досвіду;

- об'єкти, про поведінку яких є відомості емпіричного характеру; для них використовують методи фізичного моделювання із застосуванням математичного планування експерименту.

Приналежність моделі до ієрархічного рівня опису об'єкта. Ієрархічний рівень включає:

- мікрорівень (типовими процесами є масообмінні, теплофізичні, гідродинамічні), моделювання здійснюється з метою синтезу технологічного процесу для окремого або кількох агрегатів;

- макрорівень - моделювання процесів, що мають більш високий рівень агрегації; моделі застосовують для синтезу потокового управління технологічним процесом одного агрегату чи технологічного комплексу в цілому;

- метарівень — моделювання процесів у сукупності агрегатів та їх матеріально-енергетичних потоків, що їх пов'язують; такі моделі служать для синтезу технологічного комплексу як єдиного цілого, тобто синтезу управління розвитком.

За характером властивостей моделі поділяють на:

- функціональні моделі, що використовуються для опису фізичних та інформаційних процесів, що протікають при функціонуванні об'єкта;

- структурні, що описують склад та взаємозв'язки елементів системи (процесу, об'єкта).

Класифікація математичних моделей за порядком розрахунків.

Поділяють на прямі, зворотні, індуктивні:

- прямі застосовуються для визначення кінетичних, статичних та динамічних закономірностей процесів;

- зворотні (інверсійні) використовуються для визначення, наприклад, допустимих відхилень режимів обробки;

- індуктивні застосовуються для уточнення математичних рівнянь кінетики, статистики чи динаміки процесів з використанням нових гіпотез чи теорій.

Специфічні особливості всіх видів моделей відбиваються, насамперед, у завданні та формі початкових та граничних умов.

У прямих моделях кінетичні закономірності характеризують перебіг процесу у часі та встановлюють зміну у часі його параметрів: концентрацій, температур, хімічного складу при відомих потоках та параметрах робочих тіл. Статичні закономірності визначають кінцеві критичні та рівноважні значення параметрів процесу та робочого компонента.

Рівняння статистики отримують переважно при обробці експериментальних даних. Динамічні закономірності визначають властивості об'єктів розробки систем автоматичного регулювання. Динамічні властивості задаються характером вихідної реакції об'єкта на стандартні обурення на вході. Під стандартними збуреннями в хімічній технології мають на увазі, наприклад, зміну концентрації, тиску, температури та ін. Рішення застосовуваної моделі системи диференціальних рівнянь подається у вигляді

відношення зображення вихідного сигналу до зображення вхідного сигналу, яке називається переданою функцією.

Зворотні (інверсні) моделі застосовують визначення значення вхідних параметрів чи інших заданих властивостей оброблюваних речовин чи продуктів, а також визначення допустимих відхилень режимів обробки, які мають істотне вплив на якість продукту чи показники процесу. При визначенні вхідних параметрів виходять із тривалості процесу, заданих величин кінцевих параметрів або оптимальних властивостей вихідних продуктів (хімічного складу, фізичних властивостей та ін.). Зворотні моделі застосовують для моделювання кінетичних, статичних та динамічних зворотних завдань. Як правило, оберненими завданнями є завдання оптимізації процесів та параметрів апаратів.

Індуктивні моделі необхідні для встановлення чи уточнення на математичних рівняннях кінетики, статистики та динаміки процесів і найчастіше реалізуються експериментально чи аналітично з використанням нових гіпотез, форм опису чи теорій з подальшою перевіркою адекватності математичного опису. Адекватність математичного опису в регресійних моделях оцінюється зіставленням результатів статистичної обробки пробних дослідів, проведених за тих самих параметрів процесу, з розрахунковими значеннями величин, обчислених на основі математичної моделі.

Класифікація математичних моделей в залежності від використання управління процесом

Математичні моделі поділяються на:

1. Моделі прогнозу чи розрахункові моделі без управління. Основне призначення цих моделей - дати прогноз про поведінку системи в часі та в просторі, знаючи початкове співстояння та інформацію про поведінку її на кордоні.

Прикладами можуть бути моделі розподілу тепла, електричного поля, хімічної кінетики, гідродинаміки.

2. Оптимізаційні моделі:

- стаціонарні моделі використовуються лише на рівні проектування різних технологічних систем;
- динамічні — як на рівні проектування, так і, головним чином, для оптимального управління різними процесами — технологічними, економічними та ін.

У задачах оптимізації є два напрямки.

До першого належать детерміновані завдання. Вся вхідна інформація в них є повністю обумовленою.

Інше напрям відноситься до стохастичних процесів. У цих завданнях деякі параметри мають випадковий характер або містять елемент невизначеності.

Методи пошуку екстремуму функції багатьох змінних з різними обмеженнями часто називаються методами математичного програмування.

Змістивна класифікація моделей

У роботі [10] дана класифікація математичних моделей, що використовують у фізиці та у природничих науках. У роботі [11] ця класифікація проаналізована та розширена. Вона сфокусована на етапі побудови змістовної моделі.

1. *Гіпотеза.* Ці моделі є пробним описом явища, причому автор або вірить у її можливість, або вважає навіть його істинним. Приклад: модель Сонячної системи за Птолемеєм та модель Коперника (удосконалена Кеплером), модель атома Резерфорда та модель Великого Вібуху. Якщо модель першого типу побудована, це означає, що вона тимчасово признається за істину і можна сконцентруватися на інших проблемах. Однак це не може бути точкою в дослідженнях, але лише тимчасовою паузою: статус моделі першого типу може бути лише тимчасовим.

2. *Феноменологічна модель.* Ця модель містить механізм опису явища. Однак цей механізм недостатньо переконливий і не може бути підтверджений наявними даними або погано узгоджується з наявними теоріями та накопиченими знаннями про об'єкт. Тому феноменологічні моделі мають статус тимчасових рішень. Сважається, що відповідь все ще невідома, і потрібно продовжити пошук «справжніх механізмів».

Приклад: моделі теплоруду та кваркова модель елементарних частинок. Роль моделі в дослідженні може змінюватися з часом, може статися так, що нові дані та теорії підтверджують феноменологічні моделі і ті будуть підвищені до статусу гіпотези. Аналогічно, нове знання може поступово перерости у протиріччя з моделями гіпотезами першого типу і ті можуть бути переведені до іншого. Так, кваркова модель поступово перетворюється на розряд гіпотез; атомізм у фізиці виник як тимчасове рішення, але з перебігом історії перейшов у перший тип. А ось моделі ефіру і зараз перебувають поза наукою.

3. *Наближення.* Якщо можна побудувати рівняння, що описують досліджувану систему, це не означає, що їх можна вирішити навіть за допомогою комп'ютера. Загальноприйнятий прийом у разі — використання прибижень. Рівняння замінюються лінійними. Стандартний приклад — закон Ома.

4. *Спрощення.* У цій моделі відкидаються деталі, які можуть помітно не завжди контрольовно вплинути на результат. Приклади: застосування моделі ідеального газу до неідеального, рівняння стану Ван-дер-Ваальса, більшість моделей фізики твердого тіла, рідин та ядерної фізики. Путь від мікроопису до властивостей тіл (або середовищ), що складаються з великої кількості частинок, дуже довгий. Доводиться відкидати багато деталей.

5. *Евристична модель.* Евристична модель зберігає лише якісну подобу реальності та дає передбачення лише «за порядком величини». Типовий приклад - наближення середньої довжини вільного пробігу у кінетичній теорії. Воно дає прості формули для коефіцієнтів в'язкості, дифузії, теплопровідності, що узгоджуються з реальністю за порядком величини. Але

при побудові нової фізики далеко не одразу виходить модель, яка дає хоча б якісний опис об'єкта. У цьому випадку часто використовують модель за аналогією, що відображає дійсність хоч якоюсь межею.

6. *Аналогія.* Ця модель вперше виникла, коли взаємодія в системі нейтрон-протон намагалися пояснити через взаємодію атома водороду з протоном. Ця аналогія і привела до висновку, що мають бути обмінні сили взаємодії між нейтроном і протоном, які аналогічні обмінним силам у системі $\text{H} - \text{H}^+$, обумовленим переходом електрона між двома протонами.

7. *Мисленневий експеримент.* Сюди можна віднести міркування, які врешті-решт призводять до суперечності.

8. *Демонстрація можливостей.* Це теж уявні експерименти з мнимими сутностями, які демонструють, що передбачуване явище узгоджується з базовими принципами та внутрішньо несуперечливим. Один із найзнаменитіших таких експериментів — геометрія Лобачевського (Лобачевський називав її «уявною геометрією»).

Контрольні питання та завдання

1. Що таке математична модель та математичне моделювання?
2. Назвіть елементи узагальненої математичної моделі.
3. Перелічіть ознаки, якими класифікуються математичні моделі.
4. У чому різниця простих моделей від складних?
5. Перелічіть типи моделей залежно від оператора моделювання.
6. Як класифікуються моделі залежно від вхідних та вихідних параметрів?
7. Чим відрізняються дескриптивні та управлінські моделі?
8. Для яких цілей застосовуються прямі та зворотні моделі?
9. У чому відмінність моделей прогнозу оптимізаційних моделей?
10. Опишіть типи змістовної класифікації моделей.

3. ПОБУДУВАННЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ТА ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ

3.1. Етапи побудови математичної моделі

Побудова математичних моделей є досить важким процесом, що включає великі витрати матеріальних та тимчасових ресурсів, а також передбачає необхідність у фахівцях високого рівня з компетенціями як у предметній галузі, так і в таких галузях, як прикладна математика, чисельні методи, програмування, сучасні обчислювальні системи.

Серед етапів процесу побудови моделей можна виділити такі (див. рис. 13) [1–2]:

1. *Обстеження об'єкта моделювання та формулювання технічного завдання на розробку моделі.*

Конструювання моделі починається зі словесно-смыслового опису об'єкта чи явища. Ця стадія містить відомості загального характеру про природу об'єкта, інформацію про цілі його дослідження та деякі припущення. Цей етап можна назвати формулюванням передмоделі. Мета етапу - розробка змістовної постановки завдання моделювання, тобто створення сукупності питань про об'єкт моделювання, записаних у словесній формі.

2. *Концептуальна та математична постановка задачі.*

На цьому етапі відбувається завершення ідеалізації об'єкта, відкидаються несуттєві фактори та ефекти. Мета концептуальної постановки завдання полягає у формулюванні основних питань та наборі гіпотез щодо властивостей та поведінки об'єкта моделювання у термінології спеціальних дисциплін. Через війну припущення описуються математично для кількісного аналізу виконання. На етапі складання математичного опису попередньо виділяють основні явища та елементи в об'єкті та потім встановлюють зв'язки між ними. Далі шкiрного виділеного елемента та явища записують рівняння, що відбиває його функціонування. Крім того, математичний опис включають рівняння зв'язку між різними виділеними явищами. В залежності від процесу математичний опис може бути представлений у вигляді алгебраїчної системи, диференціальних рівнянь.

3. *Якісний аналіз та перевірка коректності моделі.* Для контролю правильності отриманої системи математичних відносин потрібно проведення ряду обов'язкових перевірок:

- контроль розмірності;
- контроль порядків;
- контроль характеру залежностей;
- контроль екстремальних ситуацій;
- контроль граничних умов;
- контроль фізичного змісту;
- контроль математичної замкнутості

Поняття «коректність моделі» дуже важливе, особливо у прикладній математиці, оскільки неможливе застосування чисельних методів до некоректно поставлених завдань. Встановити коректність математичного завдання є складним завданням. Для забезпечення коректності математичної моделі мають бути виконані всі контрольні перевірки.

На цьому етапі побудови математичної моделі закінчується і далі слідує «обчислювальний експеримент», проте багато авторів та наступні етапи відносять до процесу побудови математичної моделі, у зв'язку з чим обговорення поняття «обчислювальний експеримент» буде розглянуто нижче.

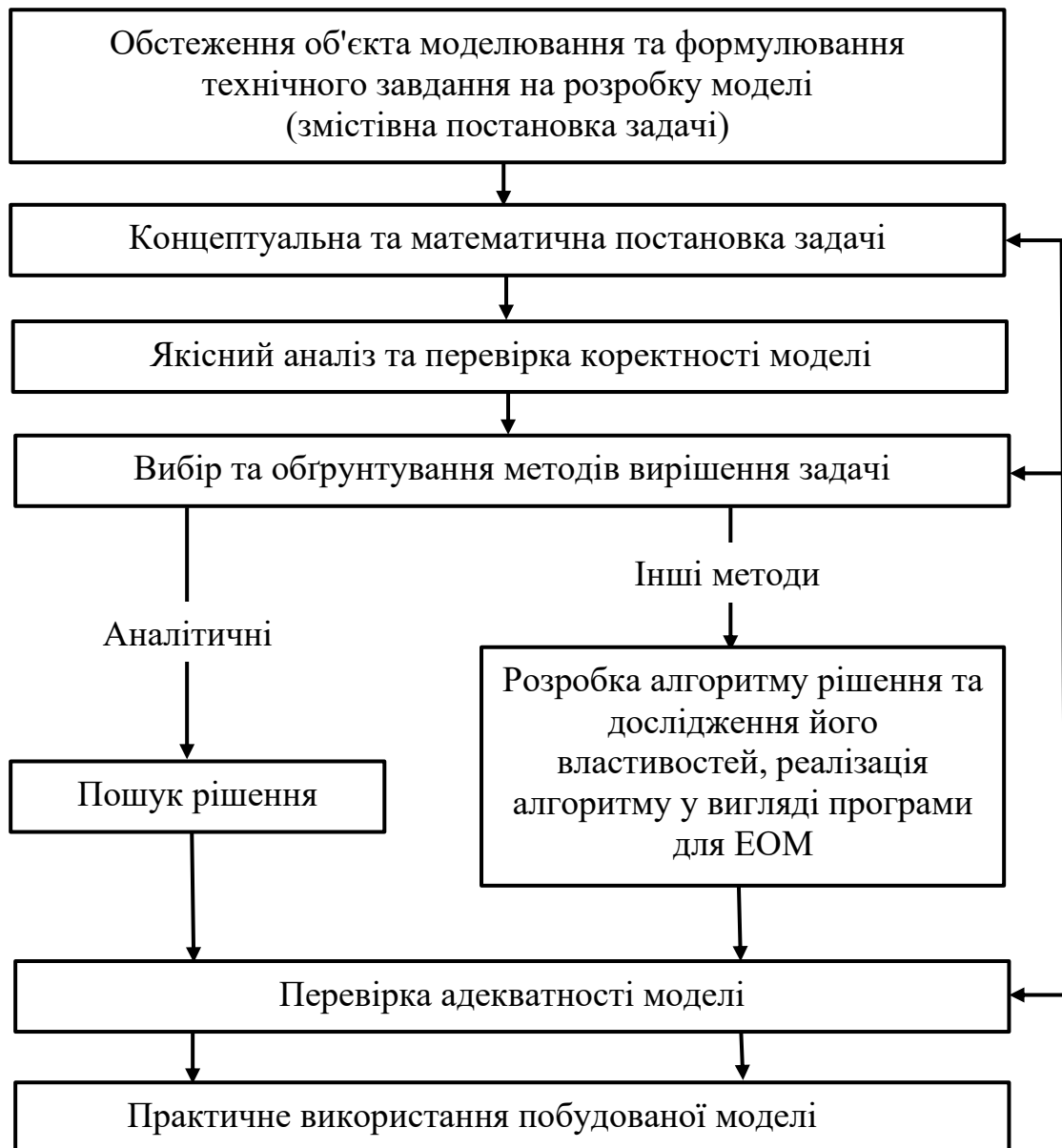


Рис. 13. Етапи побудови математичної моделі

4. *Вибір та обґрунтування вибору методів розв'язання задачі.* Створена модель досліджується будь-якими можливими методами, у тому числі із взаємною перевіркою. Оскільки всі моделі вирішуються теоретично, останнім часом широко використовуються обчислювальні методи. Ця обставина є

важливою при аналізі нелінійних об'єктів, оскільки якісна поведінка таких об'єктів невідома. Залежно від методу розв'язання задачі всі методи поділяються на:

- аналітичні. Дані методи є придатними для аналізу результатів, проте вони застосовні лише щодо простих моделей. За наявності аналітичного рішення задачі чисельне рішення практично не застосовується;
- алгоритмічні. Для алгоритмічних методів реалізується обчислювальний експеримент із комп'ютера.

Етап вибору методу вирішення та розробки моделюючої програми передбачає вибір найефективнішого (за швидкістю отримання рішення та його найбільшої точності) методу розв'язання з наявних методів, реалізацію його у формі алгоритму рішення.

4. *Пошук рішення чи реалізація алгоритму як програм для ЕОМ.* Цей етап буде розглянуто під час опису обчислювального експерименту.

5. *Перевірка адекватності моделі.* На даному етапі визначається відповідність об'єкту та сформульованим припущенням. При цьому також виконується дослідження моделі на досягнення поставленої мети будь-якими способами, наприклад, порівняння з експериментом або зіставлення з іншими підходами. Модель необхідно відкинути або модифікувати в разі отримання за її допомогою результату, що істотно відрізняється від справжнього. Етап встановлення ступеня відповідності моделі об'єкту є заключним. Для перевірки адекватності математичної моделі реальному процесу слід порівняти результати вимірів на об'єкті в ході процесу з результатами передбачення моделі в ідентичних умовах.

6. *Практичне використання моделі.* Незалежно від сфери застосування створеної моделі необхідно провести якісний та кількісний аналіз результатів моделювання, який дозволяє:

- виконати модифікацію об'єкта, що розглядається, знайти його оптимальні характеристики;
- позначити сферу застосування моделі;
- перевірити обґрунтованість гіпотез, прийнятих на етапі математичної постановки, оцінити можливість спрощення моделі з метою підвищення її ефективності за збереження необхідної точності;
- показати, в напрямі слід розвивати модель надалі.

3.2. Підходи до побудови математичних моделей

При побудові моделей використовують два принципи:

- дедуктивний (від загального до приватного);
- індуктивний (від частки до загального).

При першому підході розглядається окремий випадок загальновідомої фундаментальної моделі. Тут при заданих припущеннях відома модель пристосовується до умов моделюється об'єкта. Наприклад, можна побудувати

модель вільно падаючого тіла на основі відомого закону Ньютона і як допустиме наближення прийняти модель рівноприскореного руху для малого проміжку години. Інший спосіб передбачає висування гіпотез, декомпозицію доладного об'єкта, аналіз, потім синтез. Тут широко використовується подібність, аналогічне моделювання, висновок з метою формування будь-яких закономірностей у вигляді припущень про поведінку системи. Наприклад, таким чином відбувається моделювання будови атома.

Згадаймо моделі Томсона, Резерфорда, Бора.

Серед підходів до розробки математичних моделей відносять [12]:

1. Фундаментальні закони природи. Цей принцип є найпоширенішим і полягає у використанні фундаментальних законів природи щодо конкретної ситуації. Як правило, закони визнані, доведені досвідом та є базою науково-технічних досягнень. У цьому немає потреби у їх додаткової обґрунтованості. В результаті найголовніше питання виникає під час виборів конкретного закону на вирішення певного завдання.

2. Варіаційні засідки. Даний підхід за широтою та універсальністю порівняний з першим підходом і полягає у застосуванні варіаційних принципів, які є твердженнями про дослідження об'єкт. У цьому вибір варіантів поведінки складає підставі певних умов. Отримані варіаційні принципи класу явищ дозволяють однаково створювати відповідні математичні моделі. Цей підхід дозволяє не враховувати конкретну природу процесу.

3. Застосування аналогій при побудові моделей. Метод аналогій застосовується, коли неможливо вибрати фундаментальні закони чи варіаційні принципи. Це може бути пов'язане з тим, що на сьогоднішній момент подібні закони можуть не існувати і, отже, описати їх математично неможливо. Прикладом є найпростіша модель для динаміки популяцій (модель Мальтуса), за допомогою якої можна пояснити явище радіоактивного розпаду.

4. Ієрархічний підхід до отримання моделей. Побудова математичних моделей з урахуванням всіх значущих факторів не завжди є зручним і виправданим. Підхід реалізації «від простого до складного» в цьому випадку є більш поважним. При цьому підході створюється ієрархія повніших моделей, які узагальнюють попередні моделі як окремі випадки. Математичні моделі нижнього рівня можуть бути досить простими, типовими, що допускають широку уніфікацію та використання набору готових моделей. При ієрархічній побудові загальної моделі складної системи завдання оптимізації всієї системи розпадається ряд приватних завдань оптимізації різних рівнів. У цьому загальний критерій оптимізації поділяється на критерії шкірного рівня. Таким чином, завдання великої розмірності може бути зведене до ряду завдань меншої розмірності. При цьому слід враховувати взаємне вплив елементів та рівнів.

5. Блоковий принцип. При побудові математичних моделей широко

використовують блоковий принцип. Модель будується з окремих логічно закінчених блоків, що відображають ту чи іншу сторону процесу, що розглядається. Блоковий принцип побудови моделей дозволяє: розбити загальне завдання побудови математичної моделі на окремі підзадачі і тим самим упростити її розв'язання, а також використовувати розроблені блоки в інших моделях, модернізувати окремі блоки та замінювати їх на нові. Загальний математичний опис моделі є сукупністю математичних описів окремих блоків. Застосування блокового принципу побудови математичних моделей дозволяє у багатьох випадках вирішити проблему масштабування процесів.

Принципово кожен блок математичної моделі може мати різну міру деталізації математичного опису. Важливо лише, щоб вхідні та вихідні змінні всіх блоків моделі перебували у взаємній відповідності, що забезпечить отримання замкнутої системи рівнянь математичної моделі процесу в цілому. В ідеалі математичний опис шкірного блоку має включати рівняння, параметрами яких є лише фізико-хімічні властивості речовин. При практичному використанні блочного принципу в математичному описі шкірного блоку тому чи іншому рівні його деталізації доводиться застосовувати емпіричні співвідношення.

3.2. Обчислювальний експеримент

Зазвичай моделювання використовується для обчислення таких величин, які не можна отримати з обмежених за своїми можливостями теоретичних моделей. Якщо теорія дає бажані кількісні висновки, то моделювання навряд чи потрібне. Але моделювання часто застосовується і для розширення теоретичних моделей з метою отримання нових емпіричних знань, а також для розширення емпіричних зрозуміти в тих галузях, де вони поки що не можуть бути отримані. І тут велика роль належить обчислювальному експерименту. За рахунок розв'язання різних хімічних, фізичних, біологічних та інших завдань теоретичний аналіз перетворився на нову методологію проведення досліджень, яка називається обчислювальним експериментом. У табл. 1 показано порівняння лабораторного та обчислювального експерименту [5].

Таблиця 1. Аналогії між обчислювальним та лабораторним експериментом

Лабораторний експеримент	Вчислювальний експеримент
Зразок	Модель
Фізичний прилад	Програма для комп'ютера
Калібрівка	Тестування програми
Вимірювання	Розрахунок
Аналіз даних	Аналіз даних

Жодне технічне досягнення не вплинуло так на інтелектуальну діяльність людини, як на електронно-обчислювальні машини. Поява комп'ютерів призвело до неймовірних змін у продуктивності інтелектуальної праці за рахунок зростання швидкості виконання арифметичних та логічних операцій за допомогою ЕОМ. На початку ХХІ століття з'явилася реальна можливість використовувати їх у наукових дослідженнях не лише як великі арифмометри, а й звернутися з їхньою допомогою до вивчення таких розділів математики, які раніше були практично недоступними для досліджень. Це було зрозуміло ще під час вирішення на недосконалих ЕОМ складних математичних завдань ядерної фізики, балістики, прикладної небесної механіки.

Основа обчислювального експерименту – це математичне моделювання, теоретична база цього процесу – прикладна математика, а технічне забезпечення – це потужні електронно-обчислювальні машини. При застосуванні обчислювального експерименту проглядаються як загальні основні риси цього процесу, так і специфічні особливості конкретних завдань [3, 5, 13–14].

Наукове дослідження реального процесу можна проводити теоретично чи експериментально незалежно одне від одного. Такий шлях пізнання істини має односторонній характер. У сучасних умовах розвитку науки та техніки намагаються проводити комплексне дослідження об'єкта.

Вичислювальний експеримент – це експеримент над математичною моделлю об'єкта на ЕОМ, який полягає в тому, щоб за одними параметрами моделі обчислити інші її параметри і на цій основі зробити висновки про властивості явища, що описується математичною моделлю.

Вичислювальний експеримент є циклічний процес, що складається з наступних етапів (рис. 14):

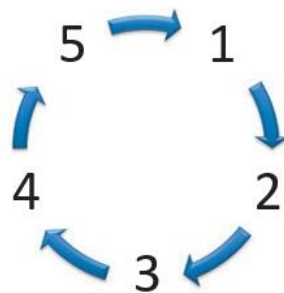


Рис. 14. Схема технологічного циклу обчислювального експерименту:

- 1 – побудова математичної моделі; 2 – розробка методу розрахунку;
- 2 - програмування; 4 - розрахунки на комп'ютері; 5 — порівняння результатів розрахунків із даними досвіду, уточнення моделей

1. *Побудова математичної моделі.* На першому етапі проводитиметься вибір фізичної моделі, для якої визначаються обов'язкові для розгляду фактори та другорядні, якими можна знехтувати. При цьому визначаються припущення чи обмеження моделі, в межах яких результати

моделювання вважатимуться коректними. Ця модель формулюється за допомогою диференціальних чи інтегро-диференціальних рівнянь, тобто з урахуванням математичних термінів. Цей етап детально розглянуто вище, в описах процесу побудови математичної моделі.

2. *Створення методу розрахунку.* В обчислювальному експерименті завжди використовують алгоритмічний метод рішення, що представляє послідовність формул алгебри та логічних операторів. При цьому для одного математичного завдання можуть бути різні обчислювальні алгоритми. Такі завдання вирішуються як приближеними, так і численними методами. Внаслідок застосування зазначених методів виникають помилки, які поділяються на три типи [2]:

- Непереборна помилка, пов'язана з неточним завданням вихідних даних.
- Погрішність методу, пов'язана з переходом до дискретного аналога вихідного завдання.
- Погрішність заокруглення, пов'язана з кінцевою розрядністю чисел на комп'ютері.

Як чисельний, так і приближений метод рішення пропонують запис як обчислювального алгоритму. Вимоги до алгоритмів, у тому числі і до обчислювальних алгоритмів [2]:

- Реалізація, тобто забезпечення вирішення задачі за допустиму машинну годину.
- Точність - отримання рішення вихідної задачі з певною погрішністю та за кінцеве число операцій.
- Економічність (ефективність), тобто. виконання меншого числа дій для досягнення однакової точності.
- Стійкість, т. е. в процесі обчислень має зростати погрішність.

Для створення найбільш точних обчислювальних алгоритмів необхідно формувати чисельні модифікації з урахуванням специфічних особливостей конкретної математичної задачі. Можна виділити такі групи чисельних методів залежно від об'єктів, яких вони застосовуються [15]:

- інтерполяція та чисельне диференціювання;
- чисельне інтегрування;
- визначення коренів лінійних та нелінійних рівнянь;
- розв'язання систем лінійних рівнянь;
- розв'язання систем нелінійних рівнянь;
- розв'язання задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь;
- вирішення крайових завдань для звичайних диференціальних рівнянь;
- розв'язання рівнянь у приватних похідних;
- розв'язання інтегральних рівнянь

Вибір методу для вирішення конкретної задачі є досить складним через існування великої кількості чисельних методів. Для реалізації моделі можливе застосування різних альтернативних алгоритмічних методів. У зв'язку з цим вибір методу рішення здійснюється в залежності від забезпечення найкращої ефективності, стійкості та точності результатів.

Розробка програми на основі алгоритму реалізації на комп'ютері. Створення надійного та функціонального програмного забезпечення (ПЗ) є, можливо, навіть більш складним у порівнянні з попередніми етапами. Реалізація на даному етапі залежить від знання сучасних алгоритмічних мов, технологій та мов кодування та ресурсу обчислювальних систем. Сучасне програмування є самостійною наукою зі своїми фундаментальними принципами, підходами та методами. У зв'язку з цим програмний комплекс є складною системою, що містить мови програмування, транслятори, компілятори та бібліотеки стандартних модулів. Процес розробки програм можна розділити на такі етапи [16]:

- створення технічного завдання;
- розробка структури програми;
- математичне опис;
- алгоритмізація;
- кодування програмною мовою;
- тестування та налагодження;
- супровід та експлуатація.

Процес від розробки математичних моделей до створення програм у середньому займає 3-5 років. Для створення кінцевого програмного комплексу необхідно продумати стратегію розвитку, забезпечити його модульність, а також узгодженість вхідних та вихідних параметрів. Серед сучасних технологій програмування виділяють такі:

- структурне програмування;
- абстрактне програмування;
- об'єктно-орієнтоване програмування;
- візуальне програмування.

Проведення розрахунків на комп'ютері. Тут найвиразніше виявляється схожість із натурним експериментом. Відмінність у цьому, що в лабораторії експериментатор за допомогою спеціально побудованої установки «задає питання» природі, тоді як фахівці з обчислювального експерименту за допомогою комп'ютера ставлять ці питання математичної моделі. Відповідь в обох випадках виходить у вигляді деякої цифрової інформації, яку слід розшифрувати. Слід зазначити, що достовірність моделі забезпечується точністю інформації під час обчислювального експерименту. Саме з цієї причини проводять тестові випробування. Вони необхідні для того, щоб «налагодити» програму та перевірити адекватність математичної моделі.

5. *Обробка результатів розрахунків.* На цьому етапі виконується всебічний аналіз результатів розрахунку та висновки, після яких або з'ясовується необхідність уточнення моделі, або результати, пройшовши перевірку на розумність і надійність, передаються замовнику для виконання.

Додатково можна продовжити класифікацію наступними етапами [3]:

6. Проводить натурний експеримент для отримання даних, необхідних для уточнення моделі.

7. Накопичення експериментальних даних.

8. Побудова математичної моделі.

9. Автоматичне побудова програмної реалізації математичної моделі.
10. Автоматизоване перебування чисельного рішення.
11. Автоматизоване перетворення обчислювальних результатів у форму, зручну для аналізу.
12. Ухвалення рішення про продовження натурних експериментів.

Тим самим основу обчислювального експерименту становить тріада: модель – алгоритм – програма. Досвід вирішення великих завдань показує, що метод математичного моделювання та обчислювальний експеримент поєднують у собі переваги традиційних теоретичних та експериментальних методів дослідження. Видозмінений ланцюжок, реалізований у вигляді єдиного програмного комплексу, і становить «технологію» обчислювального експерименту.

До основних переваг обчислювального експерименту можна віднести:

- можливість дослідження об'єкта без модифікації установки чи апарату;
- можливість дослідження кожного чинника окремо, тоді як у реальності діють одночасно;
- можливість дослідження нереалізованих практично процесів.
- Обчислювальний експеримент за допомогою математичного моделювання знаходить все нові і нові застосування в різних галузях науки і техніки [3]:

• *Енергетична проблема.* Завдання атомної промисловості ефективно вирішуються з допомогою математичного моделювання. Зокрема, при дослідженні фізичних процесів, що відбуваються в атомних та термоядерних реакторах, використовується обчислювальний експеримент, який при сукупності з натурним експериментом прискорює та спрощує дослідження у цій галузі.

• *Космічна техніка.* Математичне моделювання використовується для розрахунку руху літальних засобів, завдань аеродинамічного опору, а також для аналізу радіолокаційних даних, наприклад, зображень із супутників. Ключову роль цьому випадку грає проблема підвищення якості вимірювальної апаратури. Встановлено, що вимірювальний прилад у зв'язці з ЕОМ може отримати результати, які можна порівняти з приладами найвищої якості. У результаті сукупності вимірювальних і обчислювальних засобів дозволяє виходити новий рівень вирішення завдань.

• *Технологічні процеси.* Завдання синтезу матеріалів, у тому числі із заданими властивостями, розробка обчислювальної техніки та елементної бази, аналіз технологічних режимів конструкцій, процесів лазерної плазми вирішуються нині за допомогою математичного моделювання.

• *Екологічні проблеми.* У цій галузі математичне моделювання дозволяє вирішувати такі питання, як прогнозування та управління екологічними системами, оскільки вони можуть бути поодинокими.

• *Гео- та астрофізичні явища.* Дослідження клімату, прогнозування різних стихійних лих, а також вивчення розвитку зірок і походження Всесвіту неможливе без математичного моделювання.

- *Хімія*. Математичне моделювання застосовується для розрахунку хімічних реакцій та вивчення хімічних процесів на різних рівнях.
- *Біологія*. Найбільший інтерес до моделювання викликаний необхідністю вирішення фундаментальних проблем генетики та морфогенезу, а також створення нових перспективних методів біотехнології.

3.4. Імітаційне моделювання

В даний час не існує єдиної точки зору на запитання про те, що розуміти під імітаційним моделюванням. Визначень терміну «імітаційне моделювання» досі існує велика кількість [17–18].

Імітаційне моделювання— метод, що дозволяє будувати моделі, що описують процеси так, як вони проходили б насправді. Таку модель можна «програти» у часі як для одного випробування, так і заданої її множини. При цьому результати визначатимуться випадковим характером процесів. За цими даними можна отримати досить стійку статистику.

Інше визначення: імітаційне моделювання - це метод дослідження, при якому система, що вивчається, замінюється моделлю, з достатньою точністю описує реальну систему, і з нею проводяться експерименти з метою отримання інформації про цю систему.

Існує клас об'єктів, для яких з різних причин не розроблено аналітичних моделей, або не розроблено методи вирішення отриманої моделі. І тут математична модель замінюється імітатором чи імітаційною моделлю.

Імітаційна модель- логіко-математичний опис об'єкта, який може бути використаний для експериментування на комп'ютері з метою проектування, аналізу та оцінки функціонування об'єкта.

Імітаційну модель можна розглядати як безліч правил (диференціальних рівнянь, карт станів, автоматів, мереж тощо), які визначають, у який стан система перейде в майбутньому із заданого поточного стану. Імітація - це процес «виконання» моделі, що проводить її через (дискретні або безперервні) зміни стану в часі. Імітація як метод вирішення нетривіальних завдань отримала початковий розвиток у зв'язку зі створенням ЕОМ у 1950-х - 1960-х роках. Мета імітаційного моделювання полягає у відтворенні поведінки досліджуваної системи на основі результатів аналізу найбільш суттєвих взаємозв'язків між її елементами або, іншими словами, у розробці симулятора досліджуваної предметної галузі для проведення різних експериментів.

До імітаційного моделювання вдаються, коли:

- дорого чи неможливо експериментувати на реальному об'єкті;
- неможливо побудувати аналітичну модель: у системі є час, причинні зв'язки, наслідки, нелінійності, стохастичні (випадкові) змінні;
- необхідно імітувати поведінку системи у часі.

Спробуємо проілюструвати процес імітаційного моделювання порівняння з класичною математичною моделлю. При побудові математичної моделі складної системи може виникнути низка труднощів. Модель, як правило, містить велику кількість параметрів, багато зв'язків між елементами

та різноманітні нелінійні обмеження, реальні системи найчастіше схильні до впливу випадкових різних чинників, облік яких аналітичним шляхом представляє дуже великі труднощі, часто непереборні за великої кількості. Ці проблеми і зумовлюють застосування імітаційного моделювання. Основною перевагою імітаційного моделювання порівняно з аналітичною є можливість вирішення складніших завдань. Імітаційні моделі дозволяють досить просто враховувати такі фактори, як наявність дискретних та безперервних елементів, нелінійні характеристики елементів системи, численні випадкові дії та інші, які часто створюють труднощі під час аналітичних досліджень. В даний час імітаційне моделювання - найефективніший метод дослідження систем, а часто і єдиний практично доступний метод отримання інформації про поведінку системи, особливо на етапі її проектування.

В імітаційному моделюванні розрізняють два методи:

- метод статистичного моделювання;
- метод статистичних випробувань (Монте-Карло).

Метод Монте-Карло - чисельний метод, який застосовується для моделювання випадкових величин і функцій, ймовірнісні характеристики яких збігаються з рішеннями аналітичних завдань. Складається у багаторазовому відтворенні процесів, що є реалізаціями випадкових величин і функцій, з подальшим обробленням інформації методами математичної статистики.

Якщо цей прийом застосовується для машинної імітації з метою дослідження характеристик процесів функціонування систем, схильних до випадкових впливів, то такий метод називається методом статистичного моделювання. Метод імітаційного моделювання застосовується для оцінки варіантів структури системи, ефективності різних алгоритмів керування системою, впливу зміни різних параметрів системи. Імітаційне моделювання може бути покладено в основу структурного, алгоритмічного та параметричного синтезу систем, коли потрібно створити систему із заданими характеристиками за певних обмежень.

Області застосування імітаційного моделювання:

- фізичні процеси;
- матеріалознавство;
- нанотехнології;
- бізнес процеси;
- виробництво;
- інформаційна безпека та ін.

Статистичне моделювання

Статистичне моделювання — чисельний спосіб розв'язання математичних завдань, у якому шукані величини представляють ймовірнісними характеристиками будь-якого випадкового явища, це явище моделюється, після чого необхідні характеристики наближено визначають шляхом статистичної обробки «спостережень» моделі [19]. У цьому методі шукану величину представляють математичним очікуванням числової функції від випадкового результату явища, т. е. інтегралом ймовірнісною

мірою. Проведення кожного «експерименту» розпадається на дві частини: «розіграш» випадкового результату та подальше обчислення функції. Коли простір всіх результатів і ймовірнісний захід надто складні, розіграш проводиться послідовно кілька етапів. Випадковий вибір на кожному етапі проводиться за допомогою випадкових чисел, наприклад, генеруються яким-небудь фізичним датчиком; вживається також їх арифметична імітація - псевдовипадкові числа. Аналогічні процедури випадкового вибору використовуються у математичній статистиці та теорії ігор.

Статистичне моделювання широко застосовується на рішення на ЕОМ інтегральних рівнянь, наприклад, щодо великих систем. Вони зручні своєю універсальністю, як правило, не потребують великого обсягу пам'яті. Недолік - великі випадкові похибки, що занадто повільно убують при збільшенні кількості експериментів.

Тому розроблено прийоми перетворення моделей, що дозволяють знижувати розкид величин і обсяг модельного експерименту.

Метод Монте-Карло

При існуванні теоретичного опису методу протягом тривалого часу метод Монте-Карло набув широкого поширення тільки з появою ЕОМ, тобто завдання генерації та використання в розрахунках випадкових величин досить трудомістка задача.

Метод Монте-Карло загальна назва групи чисельних методів, заснованих на отриманні великої кількості реалізацій стохастичного (випадкового) процесу, який формується таким чином, щоб його ймовірнісні характеристики співпадали з аналогічними величинами розв'язуваного завдання [20–21]. Назва методу походить від однойменного міста в князівстві Монако, де розвинена гральна індустрія, оскільки найпростішим механічним пристроєм для генерації випадкових величин є рулетка.

Історія методу Монте-Карло

Виникнення ідеї використання випадкових явищ в області наближених обчислень прийнято відносити до 1878, коли з'явилася робота Холла про визначення числа π за допомогою випадкових кидань голки на розграфлений паралельними лініями папір. Істота справи полягає в тому, щоб експериментально відтворити подію, ймовірність якої виражається через число π , і приблизно оцінити цю можливість. Метод Монте-Карло був уперше запропонований 1949 р. Метрополісом та Уламом у статті "Метод Монте-Карло" американського журналу асоціації статистиків. Творцями методу вважають Дж. Неймана та С. Улама. Вітчизняні роботи з методу Монте-Карло з'явилися у 1955-1956 роках. З того часу накопичилася велика бібліографія методом Монте-Карло. Навіть побіжний перегляд назв робіт дозволяє зробити висновок про застосування методу Монте-Карло для вирішення прикладних завдань з великої кількості областей науки і техніки.

Спочатку метод Монте-Карло використовувався головним чином на вирішення завдань нейтронної фізики, де традиційні чисельні методи

виявилися малопридатними. Далі його вплив поширився широкий клас завдань статистичної фізики, дуже різних за змістом. Метод Монте-Карло вплинув і продовжує істотно впливати на розвиток методів обчислювальної математики (наприклад, розвиток методів чисельного інтегрування) і при вирішенні багатьох завдань успішно поєднується з іншими обчислювальними методами і доповнює їх. Його застосування виправдане насамперед у тих завданнях, які допускають теоретико-імовірнісний опис. Це пояснюється як природністю отримання відповіді з деякою заданою ймовірністю у завданнях з ймовірним змістом, так і суттєвим спрощенням процедури рішення.

Принципи отримання випадкових величин на ЕОМ

Найбільш простим механізмом отримання випадкових величин є рулетка, де нерухома стрілка в момент зупинки диска, що обертається, з цифрами вказує на конкретне значення випадкової величини.

Циклічним процесом запуску та зупинки рулетки з наступним об'єднанням отриманих у кожному циклі цифр у групи можна скласти таблицю випадкових цифр. Понад мільйон цифр містить найбільша подібна таблиця.

Досить складним завданням є отримання таблиць випадкових чисел. Для створення подібної таблиці необхідна її перевірка, оскільки фізичний пристрій генерує відмінні від рівномірного розподілу випадкові числа. Працюючи з великими таблицями випадкових чисел необхідний великий обсяг пам'яті, який займатиме відповідний файл, що зберігає цю таблицю.

Найпростішим рішенням у разі було підключення рулетки до ЕОМ. У цьому швидкодія генерації випадкових чисел значно знизиться. У цьому найбільш ефективним генератором випадкових величин будуть шуми в електронних лампах при реалізації наступного алгоритму: при перевищенні порогового значення рівня шуму парна кількість разів у розряд встановлюватиметься одиниця, інакше — нуль.

Насправді кількість генераторів дорівнює сумі розрядів псевдовипадкового числа, у яких записуються нулі і одиниці. У цьому кожному кроці формується одне повнорозрядне число, має рівномірний розподіл в інтервалі $[0, 1]$.

Недоліки цього методу генерації:

- 1) Можлива відсутність рівноймовірності нулів та одиниць через несправність електронних генераторів шуму.
- 2) Неможливість відтворюваності випадкової послідовності чисел з метою перевірки працездатності програми.

Псевдовипадкові числа

Застосування зазначених вище датчиків в ЕОМ є досить дорогим, оскільки випадкові числа в розрахунках використовуються рідко. Як вирішення зазначеної проблеми можливе використання псевдовипадкових чисел. Отримання псевдовипадкових чисел виконує ЕОМ на основі алгоритмів та функцій, закладених у математичному описі. Зазначені алгоритми та

функції постійно перевіряються, тому якість генерації псевдовипадкових чисел зазвичай забезпечується.

Однак, оскільки всі дії ЕОМ заздалегідь запрограмовані, псевдовипадкові числа, одержані таким чином, важко назвати випадковими. З метою об'єктивного застосування псевдовипадкових послідовностей необхідно розуміти їх особливості. Визначимо спочатку, що називається псевдовипадковим числом. До таких чисел відносяться числа, розраховані, як правило, за рекурентною формулою і задовольняють низці вимог, властивих випадковій величині.

Дж. фон Нейман в 1951 р. розробив перший алгоритм створення послідовності псевдовипадкових чисел, який називається метод середини квадратів, який полягає в наступному:

Нехай задано довільне 4-значне ціле число $n_1 = 5243$. При зведенні його в квадрат виходить 8-значне число $n_1^2 = 27489049$. Беремо 4 середні цифри з цього числа і позначаємо їх як $n_2 = 4890$. Після зведемо вже нове число в квадрат $n_2^2 = 23912100$ і беремо наступні 4 середні цифри. В результаті виходить число $n_3 = 9121$. Продовжуючи зазначені рекурентні дії, матимемо $n_4 = 1926$; $n_5 = 7094$; $n_6 = 3248$ і т. д. Таким чином, псевдовипадкова послідовність чисел записується в наступному вигляді: 0,5243; 0,4890; 0,9121; 0,1926; 0,7094; 0,3248 і т.д.

З вказаного вище простого алгоритму було створено складніші. Однак механізм генерації послідовності псевдовипадкових чисел не змінився і полягає в послідовному отриманні наступного значення попереднього.

Переваги методів отримання псевдовипадкових чисел:

1) Швидкість отримання випадкових чисел пропорційна швидкодії роботи ЕОМ, оскільки потрібна мінімальна кількість простих операцій для отримання псевдовипадкового числа.

2) Алгоритми та програми генерації псевдовипадкових чисел дуже прості за рахунок застосування рекурентних формул.

Відтворюваність послідовності псевдовипадкових чисел.

3) Можливість постійного використання послідовності псевдовипадкових чисел в однотипних задачах без додаткових процедур щодо їх атестації та опису зміни параметрів.

Сутність методу Монте-Карло

Сутність методу Монте-Карло полягає в наступному: потрібно знайти значення деякої досліджуваної величини. І тому вибирають таку випадкову величину X , математичне очікування якої одно: $M(X) = a$.

Практично ж надходять так: виробляють n випробувань, у яких отримують n можливих значень X ; обчислюють їх середнє арифметичне і приймають x як $\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n}$ оцінку (наближеного значення) a^* шуканого числа a :

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

Оскільки метод Монте-Карло вимагає проведення значних випробувань, його часто називають методом статистичних випробувань. Теорія цього вказує, як найбільш доцільно вибрати випадкову величину X , як знайти її можливі значення. Зокрема, розробляються способи зменшення дисперсії випадкових величин, що використовуються, в результаті чого зменшується помилка.

Метод Монте-Карло застосовується дуже часто, часом некритично та неефективним чином. Він має деякі очевидні переваги:

Він не вимагає жодних пропозицій щодо регулярності, за винятком квадратичної інтегрованості.

Це може бути корисним, оскільки часто випадкова величина — дуже складна функція, властивості регулярності якої важко встановити.

Він призводить до виконаної процедури навіть у багатовимірному випадку, коли чисельне інтегрування не застосовується, наприклад, при числі вимірювань, більшому за 10.

Його легко застосовувати за малих обмежень або без попереднього аналізу завдання.

Він має, однак, деякі недоліки, а саме:

1. Межі помилки не визначені точно, але включають певну випадковість. Це, проте, психологічніша, ніж реальна, труднощі.
2. Статична похибка зменшується повільно.
3. Необхідність мати довільні числа.

Оцінка похибки методу Монте-Карло

Нехай для отримання оцінки a^* математичного очікування M випадкової величини X було зроблено n незалежних випробувань (розіграно n можливих значень X) і по них була знайдена середня вибіркова $\bar{x}$, яка прийнята як шукана оцінка:

$$a^* = \bar{x}$$

Зрозуміло, що якщо повторити досвід, будуть отримані інші можливі значення X , отже, інша середня, отже, й інша оцінка a^* . Вже звідси впливає, що точну оцінку математичного очікування неможливо. Природно, виникає питання про величину помилки, що допускається. Обмежимося відшукуванням лише верхньої межі δ допускається помилки із заданою ймовірністю (надійністю) γ :

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

Верхня грань помилки δ , що цікавить нас, є «точність оцінки» математичного очікування за вибірковою середньою за допомогою довірчих інтервалів. Розглянемо такі три випадки.

1. Випадкова величина X розподілена нормально і її середнє

квадратичне відхилення відоме. У цьому випадку з надійністю σ верхня межа помилки

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

де n - Число випробувань (розіграних значень X); t - значення аргументу функції Лапласа, при якому $t = \frac{\gamma}{2}$, σ - Відоме середнє квадратичне відхилення X .

2. Випадкова величина X розподілена нормально, причому її середнє квадратичне відхилення невідоме. У цьому випадку з надійністю γ верхня межа помилки

$$\delta = \frac{t_{\gamma} \times S}{\sqrt{n}} \quad (4)$$

де n - Число випробувань; s - "виправлене" середнє квадратичне відхилення, t_{γ} знаходять за табличними значеннями.

3. Випадкова величина X розподілена згідно із законом, відмінним від нормального. У цьому випадку при досить великій кількості випробувань ($n > 30$) з надійністю, приблизно рівною γ , верхня межа помилки може бути обчислена за формулою (3), якщо середнє квадратичне відхилення σ випадкової величини X відомо; якщо ж σ невідомо, можна підставити у формулу (3) його оцінку s — «виправлене» середнє квадратичне відхилення чи скористатися формулою (4). Зауважимо, що чим більше n , тим менша різниця між результатами, які дають обидві формули. Це тим, що з $n \rightarrow \infty$ розподіл Стюдента прагне нормального. З викладеного випливає, що метод Монте-Карло тісно пов'язаний із завданнями теорії ймовірностей, математичної статистики та обчислювальної математики.

Серед інших обчислювальних методів метод Монте-Карло вирізняється своєю простотою та спільністю. Повільна збіжність є істотним недоліком методу, однак, можуть бути зазначені його модифікації, які забезпечують високий порядок збіжності за певних припущень. Щоправда, обчислювальна процедура ускладнюється і наближається за своєю складністю до інших процедур обчислювальної математики. Збіжність методу Монте-Карло є збіжністю ймовірно. Ця обставина навряд чи слід відносити до його недоліків, бо ймовірнісні методи достатньою мірою виправдовують себе в практичних додатках. Що ж до завдань, мають ймовірнісне опис, то збіжність ймовірно навіть у певною мірою природною щодо їх дослідженні.

Застосування методу Монте-Карло до моделювання фізичних процесів

Суть вирішення фізичних завдань методом Монте-Карло у тому, що

фізичному явищу зіставляється імітуючий імовірнісний процес, який відбиває його динаміку (іншими словами, кожному елементарному акту процесу зіставляється певна ймовірність його здійснення). Потім цей процес реалізується за допомогою набору випадкових чисел. Значення фізичних величин, що цікавлять нас, знаходяться усередненням по безлічі реалізацій моделюваного процесу.

Основною перевагою методу Монте-Карло в порівнянні з класичними чисельними методами полягає в тому, що з його допомогою можна досліджувати фізичні явища практично будь-якої складності, які інакше просто неможливо вирішити. Наприклад, розв'язати рівняння, що описують взаємодію двох атомів, буде порівняно нескладно, проте вирішити таке завдання для сотні атомів вже не реально. Крім того, для методу Монте-Карло часто характерна проста структура обчислювального алгоритму. Як правило, складається програма для здійснення одного випадкового випробування (кроку моделі). Потім це випробування повторюється необхідну кількість разів, причому кожен наступний крок не залежить від решти.

Метод Монте-Карло можна назвати «теоретичним експериментом». Дійсно, якщо точно відомі закони елементарних актів, а разом з ними і ймовірності елементарних подій, результати, одержувані цим методом, були б подібні до експериментальних даних.

3.5. Приклади математичних моделей у фізиці, хімії, біології

Моделі в задачах механіки рідини, газу та плазми, твердого та деформованого тіла

Можна навести багато прикладів, коли моделювання допомогло не тільки пояснити якісь явища в природі, техніці чи фізиці, а й передбачити або зробити нові відкриття в тих галузях людської діяльності, без яких зараз цивілізація навряд чи може обійтися. Досить згадати значення для сучасної діяльності електротехніки та електроніки, машинобудування та приладобудування, отримання, передачі та збереження енергії. У природничих науках найбільш поширені фізичні та математичні моделі. Немає жодних сумнівів у тому, що процес математизації, розвиток та застосування математичних моделей та математичного апарату будуть у найближчі роки ще більше посилюватись. Цим пояснюється зростання останніми роками інтерес до питань використання математики: як створюються математичні моделі, як вони вивчаються,

Розглянемо приклади математичних моделей у різних галузях, зокрема у фізиці [2]. Однією з перших лінійних моделей є всім добре відомий закон Гука:

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

де F - сила пружності; x - подовження (деформація) тіла; k - Коефіцієнт

пропорційності, що залежить від розмірів і матеріалу тіла, званий жорсткістю.

Виявлення лінійної залежності при досить малих деформаціях між останніми і напругами в металах дозволило зробити безліч відкриттів у фізиці та техніці, а також відкрило можливість для механіків-випробувачів просуватися вперед, розвиваючи лінійну теорію пружності, а слідом за нею і математичний апарат, придатний для побудови моделей багатьох інших явищ та процесів.

Ще більш складними моделями є рівняння математичної фізики — диференціальні рівняння у приватних похідних, які описують процеси у просторі та часі. Рівняння у приватних похідних у тривимірному просторі вперше запровадив П'єр Симон Лаплас:

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

Рівняння у приватних похідних використовуються для опису таких фізичних явищ, як теплопровідність, коливання струни, поширення лінійних хвиль різної фізичної природи та ін.

Ще одним добрим прикладом математичних моделей у фізиці є рівняння електромагнітного поля Максвелла.

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

де E - вектор напруженості електричного поля, D - вектор електричної індукції, B - вектор магнітної індукції, H - вектор напруженості магнітного поля, p - щільність заряду, j - струм зміщення

Рівняння Максвелла дозволили передбачити існування електромагнітних хвиль і визначити, що світло не що інше, як електромагнітна хвиля. Використовуючи теорію Максвелла, Лоренц свою роботу «Перетворення» застосував до тіл, що рухаються. Ця робота стала причиною створення теорії відносності. Трактат Максвелла про електрику та магнетизм відкрив нові можливості фізики.

Сюди можна віднести і фундаментальне рівняння хвильової та квантової механіки, відкрите австрійським фізиком Ервіном Шредінгером, яке описує рух частинки у заданому потенційному полі (формула (8)).

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

Рівняння Шредінгера грає у квантової теорії таку ж роль, як основне рівняння динаміки у класичній механіці. Дане рівняння було знайдено, воно описує нові фундаментальні закономірності, які неможливо вивести з колишніх класичних уявлень і теорій. Справедливість його встановлення в тому, що всі наслідки, що випливають з нього, і рішення підтверджені експериментально. Даний список можна продовжувати і далі, є закони Ньютона, перетворення Лоренца і т. д. Розглянемо деякі рівняння математичної фізики, які використовуються для опису фізичних процесів більш детально. Рівняння балансу. Опис закономірностей явищ, що вивчаються, будується на основі аналітичних виразів щодо характеристичних параметрів, що відображають їх властивості. Ці параметри діляться на екстенсивні, що залежать від маси системи або кількості частинок у системі, та інтенсивні, не пов'язані з нею. До перших належать: маса, імпульс, енергія. Величина параметрів даної системи змінюється відповідно до законів збереження, що визначають фундаментальні властивості простору, часу та матерії. Аналітичні форми законів збереження формулюються як відповідних рівнянь балансу. Представниками другого типу є тиск, температура, напруга і т.д. У більшості випадків відповідні аналітичні вирази рівнянь балансу для суцільного середовища можуть бути представлені у двох формах [8]: · часу та матерії. Аналітичні форми законів збереження формулюються як відповідних рівнянь балансу. Представниками другого типу є тиск, температура, напруга і т.д. У більшості випадків відповідні аналітичні вирази рівнянь балансу для суцільного середовища можуть бути представлені у двох формах [8]: · часу та матерії. Аналітичні форми законів збереження формулюються як відповідних рівнянь балансу. Представниками другого типу є тиск, температура, напруга і т.д. У більшості випадків відповідні аналітичні вирази рівнянь балансу для суцільного середовища можуть бути представлені у двох формах [8]: ·

у вигляді локального балансу для виділеної у просторі нерухомої області:

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

де A - довільна екстенсивна характеристика, a - відповідна їй питома величина в точці фізичного простору, p - об'ємна щільність маси речовини, $\bar{I}_A^0$ - Вектор щільності струму величини A , ω_A^0 - Щільність виробництва A всередині обсягу; у матеріальній формі, тобто. у вигляді балансу для довільного обсягу суцільного середовища, що рухається в просторі:

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

Прикладами рівнянь балансу є закони збереження імпульсу, енергії, маси та інших. Закон збереження імпульсу. Розглянемо перший із них у класичному формулюванні, який стверджує, що зміна кількості руху будь-якого індивідуального обсягу матеріального континууму дорівнює імпульсу зовнішніх сил, що діють на цей індивідуальний обсяг. В аналітичній формі його можна записати у вигляді

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

де p - об'ємна щільність маси середовища; v - швидкість середовища; $\bar{F}_k$ - Зовнішні сили (віднесені до одиниці обсягу), що діють на індивідуальний обсяг суцільного середовища.

Рівняння безперервності. Як другий приклад можна навести аналітичну форму закону збереження маси в гідрогазодинаміці, яке є диференціальним рівнянням безперервності. Для цього рівняння скористаємося локальним чи матеріальним рівнянням балансу маси системи. Прийmemo як екстенсивну характеристику A масу системи. За відсутності виробництва речовини обсягом системи ($\omega_A = 0$), враховуючи, що $a = 1$, $\bar{v}_A = v_A$ (перенесення маси здійснюється тільки гідродинамічним потоком), отримаємо

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{v}) = 0, \quad (12)$$

Вираз (12) є локальною формою рівняння безперервності. Зміна щільності речовини частинки, що рухається визначається виразом

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

Враховуючи що $\operatorname{div}(\rho \bar{v}) = \langle \bar{v}, \nabla \rho \rangle$, з виразів (12) та (13) отримуємо

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div}(\bar{v}) = 0 \quad (14)$$

Вираз (14) - матеріальна форма рівняння безперервності.

Рівняння дифузії. Ефективна густина багатокомпонентної суміші, згідно з визначенням, знаходиться як сума густин окремих компонентів $\rho_e = \rho_1 + \dots + \rho_k + \dots + \rho_n$. Масова концентрація компонентів є відношенням щільності k компонента до ефективної щільності суміші. $c_k = \rho_k / \rho_e$. Ця характеристика суміші може бути ототожнена з питомою екстенсивною характеристикою системи, оскільки представляє масу k компонента, що припадає на одиницю маси суміші. У такому разі можна записати рівняння балансу маси k компоненту суміші у вигляді

$$\rho_e \frac{dc_k}{dt} + \text{div} \bar{I}_k = \omega_k \quad (15)$$

Нерівномірне розподіл речовини k компонента обсягом суміші породжує потоки речовини, які прагнуть згладити цю нерівномірність. Розмір щільності цих потоків визначається емпіричним законом Фіка

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

де D_k - коефіцієнт дифузії k компоненту в суміші, який у загальному випадку залежить від концентрації c_k ; ω_k - Виробництво речовини k компонента в суміші в одиниці обсягу в одиницю часу. Підстановка останнього вираження рівняння матеріального балансу k компонента призводить до рівняння дифузії

$$\rho_e \frac{dc_k}{dt} = \text{div} (D_k \cdot \nabla c_k) \quad (17)$$

Матеріальна швидкість зміни концентрації при цьому визначається виразом

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

Рівняння руху рідин та газу

Форми рівнянь руху рідини та газу в ідеальному середовищі набувають наступного вигляду:

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

Отримане рівняння називається рівнянням Ейлер. Дане рівняння часто використовується для вирішення різних прикладних задач гідродинаміки та газодинаміки. Зокрема, інтегруванням цього рівняння при постійній щільності рідини виходить відоме рівняння Бернуллі для рідини, що не стискається.

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

Для руху в'язкої стисливої рідини з постійним коефіцієнтом в'язкості μ отримуємо

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

Це рівняння називається рівнянням Нав'є-Стокса. Рівняння Нав'є-Стокса одна із найважливіших у гідро динаміці і застосовують у математичному моделюванні багатьох природних явищ і технічних завдань. Будучи доповненою рівняннями перенесення тепла і переносу маси, а також відповідних масових сил, система рівнянь Нав'є-Стокса може описувати конвекцію, термодифузію в рідинах, поведінку багатокомпонентних сумішей різних рідин тощо. Якщо ж рівняння як масової сили ввести силу Лоренца і доповнити систему рівняннями Максвелла для поля в суцільному середовищі, то модель дозволяє описувати явища електро- та магніто-гідродинаміки. Зокрема такі моделі успішно застосовуються при моделюванні поведінки плазми, міжзоряного газу. Однією з застосувань системи рівнянь Нав'є-Стокса є опис течій у мантиї Землі («проблема динамо»). Також варіації рівняння Нав'є-Стокса використовуються для опису руху повітряних мас атмосфери, зокрема для формування прогнозу погоди. Для опису реальних течій у різних технічних пристроях прийнятну точність чисельного рішення можна отримати лише за такої розрахункової сітці, комірки якої менше найдрібнішого вихору. Це потребує великих витрат розрахункового часу на сучасних комп'ютерах. Тому було створено різні моделі турбулентності, які спрощують розрахунок реальних потоків. Якщо з якихось причин у рівнянні Нав'є-Стокса можна відкинути інерційні члени, то отримаємо рівняння, яке називається рівнянням Стокса: Також варіації рівняння Нав'є-Стокса використовуються для опису руху повітряних мас атмосфери, зокрема для формування прогнозу погоди. Для опису реальних течій у різних технічних пристроях прийнятну точність чисельного рішення можна отримати лише за такої розрахункової сітці, комірки якої менше найдрібнішого вихору. Це потребує великих витрат розрахункового часу на сучасних комп'ютерах. Тому було створено різні моделі турбулентності, які спрощують розрахунок реальних потоків. Якщо з якихось причин у рівнянні Нав'є-Стокса можна відкинути інерційні члени, то отримаємо рівняння, яке називається рівнянням Стокса: Також варіації рівняння Нав'є-Стокса використовуються для опису

руху повітряних мас атмосфери, зокрема для формування прогнозу погоди. Для опису реальних течій у різних технічних пристроях прийнятну точність чисельного рішення можна отримати лише за такої розрахункової сітці, комірки якої менше найдрібнішого вихору. Це потребує великих витрат розрахункового часу на сучасних комп'ютерах. Тому було створено різні моделі турбулентності, які спрощують розрахунок реальних потоків. Якщо з якихось причин у рівнянні Нав'є-Стокса можна відкинути інерційні члени, то отримаємо рівняння, яке називається рівнянням Стокса: Для опису реальних течій у різних технічних пристроях прийнятну точність чисельного рішення можна отримати лише за такої розрахункової сітці, комірки якої менше найдрібнішого вихору. Це потребує великих витрат розрахункового часу на сучасних комп'ютерах. Тому було створено різні моделі турбулентності, які спрощують розрахунок реальних потоків. Якщо з якихось причин у рівнянні Нав'є-Стокса можна відкинути інерційні члени, то отримаємо рівняння, яке називається рівнянням Стокса:

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

Моделі у хімії

Першу спробу застосування математики в хімії було зроблено М.В. Ломоносовим у його рукописі «Елементи математичної хімії». Книга була написана приблизно у вересні 1741 року. Ломоносов за аналогією з роботою І. Ньютона мав намір написати подібний хімічний трактат, в якому він хотів викласти все існуюче на той момент хімічне знання в аксіоматичній манері. У XIX столітті поняття «математична хімія» почав використовувати Дюбуа-Реймон. Першим математиком, який зацікавився комбінаторними аспектами хімії, вважається Артур Келі, який опублікував роботу з перерахування алканових ізомерів у провідному хімічному журналі. Ця робота фактично є першою роботою із застосування теорії графів у хімії. У 1894 р. було видано книгу Дж. Хелма під назвою «Принципи математичної хімії».

У сучасній хімії термін «математична хімія» було введено у 1970-х роках. Математична хімія — розділ теоретичної хімії, за священним новим застосуванням математики до хімічних завдань. Основна сфера інтересів — це математичне моделювання гіпотетично можливих фізико-хімічних та хімічних явищ і процесів, а також їх залежність від властивостей атомів та структури молекул.

Математична хімія допускає побудову моделей без залучення квантової

механіки. Критерієм істини в математичній хімії є математичний доказ, обчислювальний експеримент та порівняння результатів з експериментальними даними.

Найважливішу роль математичної хімії грає математичне моделювання з допомогою комп'ютерів. У зв'язку з цим математичну хімію, у вузькому сенсі, іноді називають комп'ютерною хімією, яку не слід плутати з обчислювальною хімією [22]. У математичній хімії розробляють нові програми математичних методів у хімії. Новизна зазвичай виражається одним із двох способів:

- розвиток нової хімічної теорії;
- розвиток нових математичних підходів, які дозволяють проникнути у суть чи вирішити проблеми хімії.

При цьому математичні засоби, що використовуються, надзвичайно різноманітні. На відміну від суто математичних наук, у математичній хімії досліджуються хімічні завдання та проблеми методами сучасної математики. Найвідомішою моделлю математичної хімії є молекулярний граф. Зазначимо, що суворе математичне та фізичне обґрунтування модель молекулярного графа знайшла лише теоретично Р. Бейдера. Фактично, теорія Р. Бейдера є новим мовою сучасної математичної і теоретичної хімії, складовими елементами якого є різні математичні, зокрема топологічні, характеристики електронної щільності. Молекулярний граф - неорієнтований зв'язний граф, що знаходиться у взаємно однозначній відповідності зі структурною формулою хімічної сполуки таким чином, що вершинам графа відповідають атоми молекули, а ребрам графа - хімічні зв'язки між цими атомами. На рис. 15 показаний приклад молекулярного графа для етилену [23].

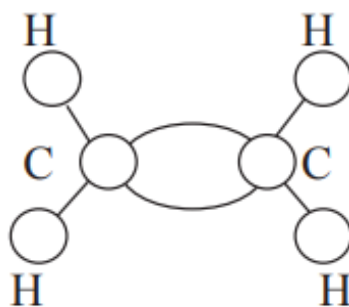


Рис. 15. Молекулярний граф етилену

Інші знамениті моделі - це закон діючих мас, створений математиком К. Гульдбергом та хіміко-експериментатором П. Вааге, граф механізму хімічних перетворень та диференціальні рівняння хімічної кінетики.

У математичній хімії застосовуються такі методи [23]:

- Теорія графів, що використовується в математичних дослідженнях ізомерії та топологічних індексів, застосовується у проблемах хімічної кінетики.
- Топологія, що застосовується у стереохімії та дослідженні властивостей поверхонь потенційної енергії.

- Теорія вузлів.
- Комбінаторика.
- Теорія груп, яка активно застосовується у квантовій хімії та стереохімії.
- Фрактальна геометрія.
- Теорія нелінійних диференціальних рівнянь, що активно застосовується у хімічній кінетиці.
- Теорія динамічних систем.
- Теорія катастроф та біфуркацій, що застосовується для опису структурних змін у молекулах.
- Операторні алгебри, що застосовуються у квантовій хімії.
- Математична логіка
- Теорія інформації та методи штучного інтелекту, що застосовуються у хімічній інформатиці (хемоінформатиці).
- Теорія інтегродиференціальних рівнянь, що застосовується для опису процесів, що протікають на неоднорідних поверхнях (гетерогенний каталіз та адсорбція).

Моделі еволюції та розвитку в біології, моделі розподілу біологічних систем.

Чим складнішими є об'єкти та процеси, якими займається наука, тим важче знайти математичні абстракції, які підходять для опису цих об'єктів та процесів.

У біологію, геологію та інші «описові науки» математика прийшла посправжньому лише у другій половині XX століття. Перші спроби математично описати біологічні процеси належать до моделей популяційної динаміки.

Ця область математичної біології й надалі служила математичним полігоном, у якому «відпрацьовувалися» математичні моделі у різних галузях біології, зокрема моделі еволюції, мікробіології, імунології та інших галузей, що з клітинними популяціями [24].

Найперша відома модель, сформульована в біологічній постановці, - це знаменитий ряд Фібоначчі, який наводить у своїй праці Леонардо з Пізи в XIII столітті.

Це ряд чисел, що описує кількість пар кроликів, які народжуються щомісяця, якщо кролики починають розмножуватися з другого місяця і щомісяця дають потомство як пари кроликів.

Ряд представляє послідовність чисел: 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233...

Якщо описати цей ряд математично, кожен наступний член даного ряду дорівнює сумі двох попередніх, починаючи з третього члена. Наступна відома історія моделі — модель Мальтуса (1778 р.), що описує розмноження популяції зі швидкістю, пропорційною її чисельності [2]. У дискретному вигляді цей закон є геометричною прогресією, яка у вигляді диференціального рівняння являє собою модель експоненціального зростання популяції і добре

описує зростання клітинних популяцій без будь-якого лімітування. На цих моделях видно, наскільки примітивні математичні моделі в порівнянні з біологічними об'єктами.

Так, населення - це сукупність складно організованих індивідуальних особин організмів. У свою чергу кожен організм складається з органів, тканин та клітин, здійснює процеси метаболізму, рухається, народжується, росте, розмножується, старіє та вмирає. І кожна жива клітина - складна гетерогенна система, об'єм якої розмежований мембранами і містить субклітинні органели, і так далі, аж до біомакромолекул, амінокислот і поліпептидів.

Зрозуміло, що з таких систем будь-яка математика дає лише грубе спрощене опис. Моделі в біології застосовуються для моделювання біологічних структур, функцій та процесів на різних рівнях організації живого: молекулярному, субклітинному, клітинному, органно-системному, організмівому та популяційно-біоценотичному.

Можливе також моделювання різних біологічних феноменів, а також умов життєдіяльності від ділових особин, популяцій та екосистем.

Види моделей у біології.

У біології застосовуються в основному моделі трьох видів:

1. Біологічні. У нашому курсі ми їх не розглядаємо.

2. Фізико-хімічні. Фізико-хімічні моделі відтворюють фізичними чи хімічними засобами біологічні структури, функції чи процеси. Починаючи з 60-х років XIX ст. були зроблені спроби створення фізико-хімічної моделі структури та деяких функцій клітин. Так, німецький вчений Траубе у 1867 р. імітував зростання живої клітини, а французький фізик С. Ледюк у 1907 р. отримав структури, що зовні нагадують водорості та гриби. Пізніше складніші моделі будувалися на принципах електротехніки та електроніки. Наприклад, на основі даних електрофізіологічних досліджень були побудовані електронні схеми, що моделюють біоелектричні потенціали в нервовій клітині, її відростку та в синапсі. Успіхи також були досягнуті у моделюванні фізико-хімічних умов існування живих організмів або їх органів та клітин: підібрано розчини неорганічних та органічних речовин (розчини Рінгера, Локка, Тіроде та ін.), що імітують внутрішнє середовище організму та підтримують існування ізолюваних органів або культивуються поза організмом клітин. Моделі біологічних мембран дозволяють досліджувати фізико-хімічні основи процесів транспорту іонів та вплив на нього різних факторів. За допомогою хімічних реакцій, що протікають у розчинах в автоколивальному режимі, моделюють коливальні процеси, характерні для багатьох біологічних феноменів - диференціювання, морфогенезу, явищ у складних нейронних мережах і т.д. Моделі біологічних мембран дозволяють досліджувати фізико-хімічні основи процесів транспорту іонів та вплив на нього різних факторів. За допомогою хімічних реакцій, що протікають у розчинах в автоколивальному режимі, моделюють коливальні процеси, характерні для багатьох біологічних феноменів - диференціювання, морфогенезу, явищ у складних нейронних мережах і т.д. Моделі біологічних мембран дозволяють досліджувати фізико-

хімічні основи процесів транспорту іонів та вплив на нього різних факторів. За допомогою хімічних реакцій, що протікають у розчинах в автоколивальному режимі, моделюють коливальні процеси, характерні для багатьох біологічних феноменів - диференціювання, морфогенезу, явищ у складних нейронних мережах і т.д.

3. Математичні (логіко-математичні). Математичні моделі будуються на основі даних експерименту або умоглядно, формалізовано описують гіпотезу або теорію біологічного феномену та вимагають подальшої дослідної перевірки.

«Програвання» математичної моделі біологічного явища на ЕОМ часто дозволяє передбачати характер зміни досліджуваного біологічного процесу в умовах, що важко відтворюються в експерименті. Математична модель в окремих випадках дозволяє передбачити деякі явища, які раніше не відомі досліднику.

Наприклад, модель серцевої діяльності, запропонована голландськими вченими Ван дер Полем і Ван дер Марком, заснована на теорії релаксаційних коливань, вказала на можливість особливого порушення серцевого ритму, згодом виявленого у людини.

До математичних моделей фізіологічних явищ відносять моделі збудження нервового волокна, розроблені англійськими вченими А. Ходжкін та А. Хакслі. На основі теорії нервових мереж американських учених У. Мак-Каллока та У. Пітса будуються логіко-математичні моделі взаємодії нейронів. Системи диференціальних та інтегральних рівнянь покладено основою моделювання біоценозів (В. Вольтерра, А. М. Колмогоров).

Модель «хижак-жертва»

Математична модель найбільш простий, тобто двовидової системи «хижак-жертва», ґрунтується на наступних положеннях [1]:

- 1) чисельності популяцій жертв N і хижаків M залежить тільки від часу;
- 2) відсутність взаємодії чисельність видів змінюється за моделлю Мальтуса; при цьому кількість жертв збільшується, а кількість хижаків падає, тому що їм у цьому випадку нема чим харчуватися:

$$\begin{aligned}\frac{dN}{dt} &= \alpha N, \\ \frac{dM}{dt} &= \beta M, \\ \alpha &> 0, \beta > 0.\end{aligned}\tag{23}$$

де α і β - коефіцієнти народжуваності та смертності;

- 3) природна смертність жертви та природна народжуваність хижака вважаються несуттєвими;
- 4) ефект насичення чисельності обох популяцій не враховується;
- 5) швидкість зростання чисельності жертви зменшується пропорційно

до чисельності хижаків dM , $c > 0$, а темп зростання хижаків збільшується пропорційно до чисельності жертви dN . Враховуючи вказані вище припущення, отримуємо систему рівнянь Лотки-Вольтерра

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

$$\frac{dM}{dt} = (-\beta + dN)M. \quad (25b)$$

Чисельності популяцій жертви та хижака здійснюють періодичні коливання навколо положення рівноваги. Амплітуда коливань та його період визначаються початковими значеннями чисельностей $N(0)$, $M(0)$.

Коливання, сутність яких цілком зрозуміла (і вони реально спостерігаються в природі), означають виникнення у двовидових популяційних системах значно складніших процесів, ніж у одновидових системах.

Більш точні математичні описи двовидових взаємодій враховують нерівномірність розподілу чисельності популяцій на займаних територіях (їм відповідають системи рівнянь у приватних похідних), тимчасове запізнення між народженням особин та його зрілістю тощо.

Виникають набагато складніші картини взаємодії як у часі, і у просторі.

Загальні моделі еволюції. Методи теоретичної популяційної генетики. Теорія нейтральності М. Кімури

1. Класична популяційна генетика.

Синтетична теорія еволюції була розвинена на початку ХХ століття. Вона заснована на вченні Ч. Дарвіна про природний відбір і на уявленнях Менделя про гени, тобто дискретні елементи передачі спадкових ознак. Велику роль становленні синтетичної теорії еволюції зіграла маленька плодова мушка *Drosophila*. Саме експерименти на цій мушці дозволили примирити здається протиріччя між Дарвінівським уявленням про поступове накопичення корисних змін і успадкування цих змін і дискретним характером Менделєєвської генетики.

Експерименти на дрозофілі показали, що мутаційні зміни можуть бути невеликими. Математичні моделі синтетичної теорії еволюції були розроблені Р. Фішером, Дж. Холдейном та С. Райтом.

Здебільшого ця математична теорія класичної популяційної генетики було завершено на початку 30-х рр. н. ХХ ст. Відповідно до синтетичної теорії еволюції, основним механізмом прогресивної еволюції є відбір організмів, які отримують вигідні мутації.

Математичні моделі популяційної генетики кількісно характеризують динаміку розподілу частот генів в популяції, що еволюціонує.

Є два основні типи моделей:

- *Детерміністичні моделі.* Детерміністичні моделі припускають, що чисельність популяції дуже велика. І тут флуктуаціями у розподілі частот генів можна знехтувати і динаміку популяції можна описати у термінах середніх частот генів.

- *Стохастичні моделі.* Стохастичні моделі описують імовірнісні процеси у популяціях кінцевої чисельності.

2. Молекулярна еволюція: теорія нейтральності.

У 1950-1960-х роках відбулася революція в молекулярній біології. Було визначено структуру ДНК, розшифровано генетичний код, вчені встановили загальні принципи роботи молекулярно-генетичної системи живої клітини. Аналізуючи експериментальні дані, М. Кімура виявив, що коли він намагався пояснити ці експерименти на основі селекції сприятливих мутацій шляхом Дарвінівського відбору, виникли серйозні труднощі.

Основне припущення цієї теорії полягає в наступному: на молекулярному рівні мутації переважно нейтральні або безпечні. Це припущення узгоджується з експериментально спостерігається швидкістю амінокислотних замінів і з тим фактом, що швидкість замінів у менш важливих частинах білків значно більша, ніж для активних центрів макромолекул.

Використовуючи математичні методи популяційної генетики, Кімура отримав ряд наслідків теорії, які перебувають у досить добрій згоді з даними молекулярної генетики. Математичні моделі теорії нейтральності значно стохастичні, т. е. щодо мала чисельність популяції грає значної ролі у фіксації нейтральних мутацій.

Згідно з теорією Кімури, дуплікація генних ділянок створює додаткові, надлишкові ДНК-послідовності, які в свою чергу дрейфують далі за рахунок випадкових мутацій, надаючи тим самим сирий матеріал, з якого можуть виникати нові, біологічно значущі гени.

Теорія нейтральності - одна з найбільш розроблених загальних теорій еволюції. Однак є низка моделей і концепцій, що також характеризують еволюцію на молекулярному рівні, які переважно доповнюють теорію нейтральності.

Зазначимо найвідоміші з них:

- Модель Д.С. Чернавського та Н.М. Чернавській, де зроблено оцінку ймовірності випадкового формування нового біологічно значущого білка.

- Модель блочно-ієрархічного еволюційного відбору, за якою нові генетичні тексти великої довжини спочатку випадково складаються з коротких текстів, оптимізованих попередні еволюційні епохи, а після складання оптимізуються.

- Блочно-модульний принцип організації та еволюції молекулярно-генетичних систем управління обґрунтовується В.А. Ратнер. Згідно з ним еволюція генів, РНК, білків, геномів та молекулярних систем управління на їх основі йшла шляхом комбінування блоків (модулів) знизу догори.

- Модель «геновмутаторів», яка передбачає, що рівень мутацій

може змінюватись і успадковуватися.

3.6. Методологія моделювання щодо пошуку оптимального рішення для інтелектуальних систем інформаційної підтримки

Алгоритм визначення структури математичних моделей об'єктів чи процесів

Одним із шляхів підвищення ефективності систем управління та обробки інформації є використання більш точних та достовірних математичних моделей об'єктів чи процесів на основі застосування сучасних методів ідентифікації, що стає можливим із застосуванням досягнень цифрової обчислювальної техніки.

Відомі з літературних джерел [21, 25] підходи до побудови математичних моделей ґрунтуються на використанні регресійного аналізу. При цьому використовується кореляційний, дисперсійний та факторний аналізи, а також аналіз показників суттєвості змінних. Основна мета перерахованих методів полягає у виявленні та виключенні з числа аргументів досліджуваної моделі факторів, що незначно впливають на вихід вихідну змінну моделі.

Крім регресійного аналізу, одним із рекомендованих методів побудови математичних моделей об'єктів є метод групового обліку аргументів (МГУА) [22], що забезпечує порівняно з регресивним аналізом об'єктивний характер моделювання та структурної ідентифікації об'єкта [6, 7, 20]. Об'єктивність досягається тим, що з побудові моделей керуються не заздалегідь заданим числовим значенням окремих обмежень (наприклад, порогового коефіцієнта парної кореляції, критерію суттєвості Стюдента), а критеріями загального виду: критерію регулярності, мінімуму зміщення та інших.

Як критерій селекції (вибору структури моделі оптимальної складності) нами рекомендовано [15] використовувати критерій мінімуму зміщення (η_{cm}), що дозволяє вирішувати завдання відновлення закону, прихованого в зашумлених експериментальних даних та застосовуваного внаслідок цього для завдання ідентифікації

$$\eta_{cm}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (q_{A_i} - q_{B_i})^2}{\sum_{i=1}^N q_{T_i}} \rightarrow \min ,$$

де N - усі точки таблиці вихідних даних; q – вихідна величина; q_A - значення q , розраховані за моделлю, оцінки параметрів якої отримані за точками з великим значенням дисперсії вихідної величини; q_B - те саме, за точками з меншим значенням дисперсії вихідної величини; q_T - Табличне значення зміню.

У МГУА застосовуються дві основні структури генерації безлічі моделей, що оцінюються за критерієм селекції:

1. Комбінаторні (не порогові) алгоритми МГУА.
2. Багаторядні (порогові) алгоритми МГУА.

У першому випадку потрібно завдання, явно ускладненої математичної залежності вихідної величини від вектору вхідних змінних, наприклад, у вигляді полінома високого ступеня, з якої шляхом прирівнювання нулю тих чи інших коефіцієнтів виходять математичні моделі різної структури. Найкраща структура визначається за тим чи іншим критерієм селекції.

У багаторядному алгоритмі спочатку першому ряду селекції утворюються математичні залежності (приватні описи), кожна з яких пов'язує вихідну величину з двома змінними. Отримані приватні описи порівнюються за критерієм селекції, і їх вибирається F_1 найкращих. На другому ряду селекції утворюються приватні описи, кожен з яких пов'язує вихідну величину з двома змінними, як виступають приватні описи, отримані на попередньому ряду селекції. З нових приватних описів вибирається F_2 найкращих для використання у наступному, третьому ряду селекції. Для кожного ряду є найкраща (за критерієм селекції) модель. Ряди селекції збільшуються, поки оцінка критерію зменшується (правило зупинки).

Розв'язуване нами завдання обумовлено необхідністю розробки досконалішого алгоритму, визначення структури математичної моделі чи процесу.

Поставлена мета визначила необхідність вирішення наступних завдань:

- Розробка комбінованого алгоритму;
- Практична реалізація комбінованого алгоритму у вигляді блок-схеми.

Для вирішення сформульованих завдань використовувалися методи математичного моделювання та програмування.

Пропонований нами модифікований алгоритм МГУА для побудови математичних моделей забезпечує визначення в кожному циклі селекції структуру чіткого опису з використанням для його побудови комбінаторного алгоритму.

У цьому використовуються таблиці поступового ускладнення полінома двох змінних.

Алгоритм представлено на рис. 16, де прийняті такі позначення:

1. Початок.
2. Введення експериментальних даних, розрахунок значень функції відгуку за експериментальними даними Y_i та значень аргументів моделі X_{ij} ($i = 1, \dots, N; j = 1, \dots, M$); N – число вимірювань; M – число вихідних змінних моделі).
3. Ранжування точок $\{Y\}$ з дисперсії, виділення навчальної $\{YB_i\}$ та перевіркою $\{YA_i\}$ послідовностей $\{YB_i\}$ - Точки з меншим значенням дисперсії вихідної величини; $\{YA_i\}$ - Крапка з великим її значенням.
4. Визначення числа окремих описів K :

$$K = C_m^2 = \frac{M!}{2!(M-2)!}.$$

5. Початок циклу за рядами селекції: $S = 1$.
6. Початок циклу за окремими описами.
7. Вибір найпростішої структури для 2-х змінних G -го опису.
8. Початок циклу структурами: $L = 1$.
9. Розрахунок параметрів моделі МНК G -го опису $\{YA_i\} (A_a)$ і $\{YB_i\} (A_b)$ розрахунок η_{cm} для G -го опису.
10. $(L = 1)$?
11. Визначення критерію для G -го опису: $KR_G = \eta_{cm}$; $L = L + 1$.
12. Ускладнення структури.
13. $(KR_G \leq \eta_{cm})$?
14. Як G -го опису приймається структура, що відповідає $(L-1)$ -му циклу, розрахунок змінної за G -м описом Z_{qi} ($i = 1, \dots, N$); у наступному ряді селекції $\{Z_{qi}\}$ є аргументами приватних описів оптимальної складності
15. $(G = K)$?
16. $G = G + 1$.
17. Вибір M найкращих приватних описів по $\min KR_G$; $KR1_s = \min KR_G (1, \dots, K)$.
18. $(S = 1)$?
19. $S = S + 1$.
20. $(KR1_s < KR1_{s-1})$?
21. Визначення оптимальної структури моделі: як структура оптимальної складності приймається структура моделі з найменшим значенням критерію на попередньому $(S - 1)$ – m ряду селекції.
22. Кінець.

Використання запропонованого алгоритму забезпечує отримання більш точних та достовірних математичних моделей об'єктів та процесів. Витрати часу для отримання структури математичної моделі знаходяться у функціональній залежності від складності об'єкта або процесу.

Використання евристичного методу для побудови математичних моделей складних об'єктів керування СПП

Сучасні СПП, як складні об'єкти управління, характеризуються такими відмінними рисами:

- Наявністю великої кількості вхідних впливів;
- складним характером залежності між вхідними та вихідними змінними;
- Високим рівнем перешкод;
- обмеженим числом датчиків та вимірювальних пристроїв та ін.

У цьому застосування традиційних (балансових чи експериментально - статистичних) моделей керувати об'єктом немає належного ефекту. У цих випадках доцільно використовувати евристичний метод, який використовує для визначення необхідних залежностей та побудови алгоритмів управління, узагальнену думку та формалізації дій кваліфікованих фахівців (експертів).

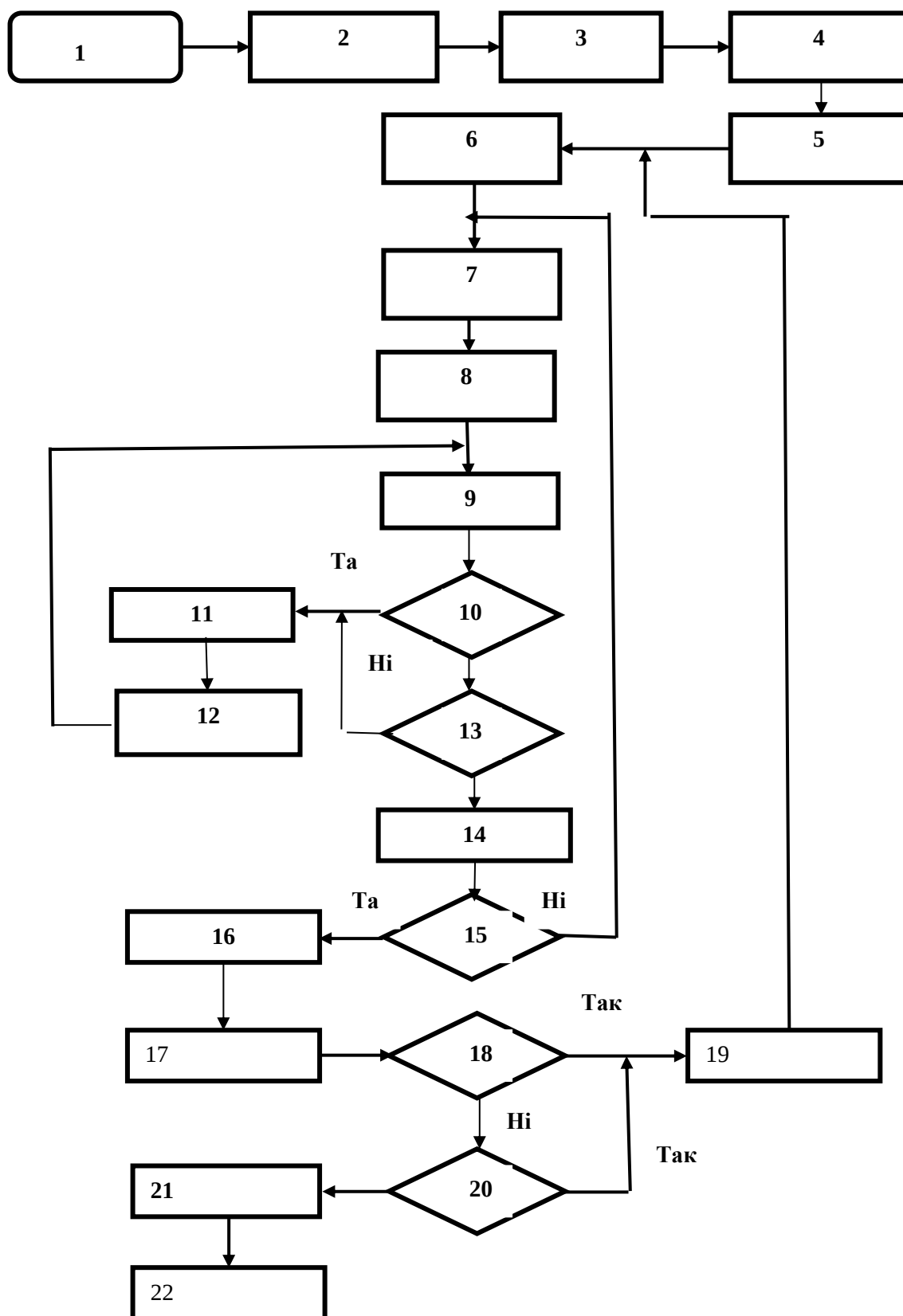


Рис. 16. Блок-схема алгоритму визначення структури математичної моделі процесу чи об'єкта

У цьому виникає проблема розробки евристичного методу, який використовує визначення необхідних залежностей і побудови алгоритмів управління узагальнену думку і формалізацію дій кваліфікованих фахівців (експертів).

Проведеним аналізом літературних джерел [12, 13, 15] нами встановлено, що традиційний метод побудови математичних моделей полягає у вичерпному завданні елементів, що входять до об'єкта управління, та всіх зв'язків між елементами або заснований на проведенні багатофакторного експерименту. Тому основною метою є розробка методу побудови моделі управління у відсутності апріорної інформації про характер залежності між змінними, що входять до її складу.

Для вирішення поставленої задачі використовували методи системного аналізу, статистики та інтегрального обчислення.

Розв'язання задачі побудови математичної моделі складного об'єкта управління засноване на оцінюванні залежності в об'єкті залежності керуючих впливів. $\bar{U}^0$ на інтервалі управління $[\tau]$ від $\bar{X}^0$ $\bar{Y}_s^0$, застосованому на попередніх інтервалах $[\tau - 1], [\tau - 2], \dots$ управління:

$$\bar{Y}^0[\tau] = f(\bar{X}^0, \bar{Y}_s^0, \bar{U}^0[\tau - 1], \bar{U}^0[\tau - 2], \dots) = f(\bar{V}^0), \quad (26)$$

де $\bar{V}^0$ - Вектор стану на $[\tau]$ - м інтервалі управління. Індекс "0" відповідає вибірці позитивного досвіду.

Про аналітичний вид функції $f(\bar{V})$ відомо тільки те, що вона може бути як завгодно складною.

Введемо деяку оцінку функції (26)

$$\hat{\bar{U}}^0[\tau] = \hat{f}(\bar{V}^0),$$

і оптимізуватимемо значення параметрів цієї функції за мінімумом середньоквадратичної помилки, тобто будуватимемо таку оцінку, при якій критерій

$$I(\bar{U}^0[\tau], \hat{f}(\bar{V}^0)) = \frac{[\bar{U}_i[\tau] - \hat{f}(\bar{V}_i)]^2}{n} \rightarrow \min. \quad (27)$$

Отже, завдання побудови математичних моделей процесів СПП, реалізованих об'єктом управління, зводиться до процедури конструювання оптимальної оцінки (мінімуму) критерію (27). При побудові моделі, коли апріорна інформація про характер залежності між змінними, що входять до її складу, невідома доцільно застосувати підхід, заснований на використанні непараметричних оцінок умовного математичного очікування.

$$\frac{M(\bar{U}[\tau])}{\bar{V}}.$$

Використання умовного математичного очікування як оцінка функції (26) забезпечує мінімум критерію (27), тобто.

$$I(\bar{U}[\tau], \hat{f}(\bar{V})) = \min I(\bar{U}[\tau], f(\bar{V})), \text{ при } \hat{U}[\tau] = \frac{M(\bar{U}[\tau])}{\bar{V}},$$

або в інтегральній формі

$$\bar{U}[\tau] = \int_0^\tau \left(\bar{U}[\tau] P\left(\frac{\bar{U}[\tau]}{\bar{V}}\right) \right) d\bar{U}[\tau].$$

Враховуючи що $P\left(\frac{Y}{\bar{X}}\right) = P\left(\frac{Y, \bar{X}}{\bar{X}}\right)$, умовне математичне очікування перетворимо на вигляд

$$M\left(\frac{\bar{U}[\tau]}{\bar{V}}\right) = \int_0^\tau \frac{\bar{U}[\tau] P(\bar{V}, \bar{U}[\tau]) d\bar{U}[\tau]}{P(\bar{V})}. \quad (28)$$

Замість апіорі невідомих функцій щільності ймовірності $P(\bar{V})$ і $P(\bar{V}, \bar{U}[\tau])$ використовуємо їх непараметричні оцінки відповідно:

$$\hat{P}(\bar{V}) = \frac{\left[\sum_{i=1}^n P^*(\bar{V}, \bar{V}_i) \right]}{n}, \quad (29)$$

$$\text{і } P(\bar{V}, \bar{U}[\tau]) = \frac{\left[\sum_{i=1}^n P^*\{\bar{V}, \bar{U}[\tau], \bar{V}_i, \bar{U}_i[\tau]\} \right]}{n}. \quad (30)$$

Відомо, що такі оцінки асимптотично сходяться до $P(\bar{V})$ і $P(\bar{V}, \bar{U}[\tau])$ за умови, що функції вкладів $n P^*(\bar{V}, \bar{V}_i)$, $i=1, 2, \dots$, симетричні щодо відповідних векторів $\bar{V}_i$ (кожен з них є математичним очікуванням відповідної йому функції вкладів), невід'ємні, спадають при $n \rightarrow \infty$ та одиничної площі. Крім того, розмах цієї функції асимптотично зменшується в міру збільшення n . Асимптотична збіжність оцінок (2.4) і (30) зумовлює асимптотичну збіжність тих, що використовують ці оцінки, непараметричну конструкцію умовного математичного очікування у формі (28).

Введемо функцію вкладів виду

$$P^*(\bar{V}, \bar{V}_i) = \left[\frac{1}{\sigma_i^m} (2\pi)^{\frac{m}{2}} \right] \exp \left[\frac{-d^2(\bar{V}, \bar{V}_i)}{2\sigma_i^2} \right], \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (31)$$

$$i P^* \{(\bar{V}, \bar{U}[\tau]), (\bar{V}_i, \bar{U}_i[\tau])\} = \left[\frac{1}{\sigma_i^{m+1} (2\pi)^{\frac{(m+1)}{2}}} \right] \exp \left(-d^2 \frac{\{(\bar{V}, \bar{U}[\tau]), (\bar{V}_i, \bar{U}_i[\tau])\}}{2\sigma_i^2} \right).$$

Враховуючи що $d^2 \{(\bar{V}, \bar{U}[\tau]), (\bar{V}_i, \bar{U}_i[\tau])\} = d^2(\bar{U}[\tau], \bar{U}_i[\tau]) + d^2(\bar{V}, \bar{V}_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$, Виразимо $P^* \{(\bar{V}, \bar{U}[\tau]), (\bar{V}_i, \bar{U}_i[\tau])\} = P^*(\bar{V}, \bar{V}_i) P^*(\bar{U}[\tau], \bar{U}_i[\tau])$.

Введемо у формулу (28) замість невідомих функцій $P(\bar{V})$ і $P(\bar{V}, \bar{U}[\tau])$ їх непараметричні оцінки (29) та (30). Враховуючи, що інтегрування ведеться за змінною $\bar{U}[\tau]$, отримуємо

$$\bar{U}[\tau] = \frac{\left\{ \sum_{i=1}^n P^*(\bar{V}, \bar{V}_i) \int_0^{\tau} \bar{U}[\tau] P^*(\bar{U}[\tau], \bar{U}_i[\tau]) d\bar{U}[\tau] \right\}}{\Sigma P^*(\bar{V}, \bar{V}_i)}. \quad (32)$$

У формулі (32) і - й інтеграл є математичним очікуванням змінної $\bar{U}[\tau]$, розподіленою відповідно до $P^*(\bar{U}[\tau], \bar{U}_i[\tau])$, для якої змінна $\bar{U}_i[\tau]$ є математичним очікуванням.

Отже,

$$\int_0^{\tau} \bar{U}[\tau] P^*(\bar{U}[\tau], \bar{U}_i[\tau]) d\bar{U}[\tau] = \bar{U}_i[\tau], \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (33)$$

Підставляючи (33) (32), отримуємо наступне вираз для моделі процесу управління на $[\tau]$ - м інтервалі управління:

$$\hat{\bar{U}}^0[\tau] = \frac{\sum_{i=1}^n U_i[\tau] P^*(\bar{V}^0, \bar{V}_i)}{\Sigma P^*(\bar{V}^0, \bar{V}_i)}, \quad (34)$$

де $\bar{U}_i(\tau)$ - значення керуючих впливів, застосованих при виконанні реалізованого процесу вибірки позитивного досвіду $[\tau]$ -м інтервалі управління, а функція вкладу $P(\bar{V}^0, \bar{V}_i)$ визначено формулою (31).

Якщо функцію вкладу $P^*(\bar{V}^0, \bar{V}_i)$, задану у вигляді (31), апроксимувати прямокутною функцією

$$P(\bar{V}^0, \bar{V}_i) = \begin{cases} 1, \text{если } d(\bar{V}^0, \bar{V}) = \min d(\bar{V}^0, \bar{V}_j), i \neq j \\ 0 \text{ в противном случае,} \end{cases}$$

де $d(\bar{V}^0, \bar{V}_i)$ - міра близькості між векторами $\bar{V}^0$ і $\bar{V}_i$, то формула (32) перетворюється на вигляд

$$\bar{U}[\tau] = U_i[\tau], \quad (35)$$

тобто. управління на $[\tau]$ інтервалі приймається рівним управлінню на цьому ж інтервалі часу раніше успішно завершеного циклу вибірки позитивного досвіду, який найбільш схожий на процес, що проводиться (вектори $\bar{V}^0$ і $\bar{V}_i$ близькі один до одного).

Незважаючи на загальну непараметричну природу математичних моделей $\hat{U}^0[\tau]$ і $\bar{U}[\tau]$, алгоритми, що використовують їх виходять різними-перша модель враховує всі управління, застосовані на $[\tau]$ -м інтервалі вибірки позитивного досвіду з властивим кожному процесу вибірки значенням вагового коефіцієнта; друга модель зводиться до пошуку у вибірці позитивного досвіду єдиної та найбільш схожої до цього $[\tau]$ -му моменту раніше проведеного процесу.

Модифікований алгоритм глобального статистичного пошуку екстремуму оптимізованих функцій з дискретною зміною їх аргументів

У зв'язку з переходом на економічні методи управління народним господарством намічено новий перспективний етап комплексної автоматизації промислових виробництв на основі використання інтегрованих систем автоматизованого управління (ІАСУ). Поряд із завданнями управління доводиться вирішувати також і оптимізаційні завдання. Подальше розширення робіт з

розроблення та впровадження ІАСУ пов'язано, перш за все, зі збільшенням оптимізаційних завдань.

При оптимізації процесів СПП, параметри яких можуть набувати лише чисельних чи дискретних значень, виникають труднощі, які полягають у тому, що алгоритми, що моделюють функціонування виробничих систем, дозволяючи отримувати чисельні значення їх характеристик та обраних критеріїв оптимальності лише в окремих точках, не дають можливості оцінити характер функції загалом. Викладені обставини практично виключають можливість застосування класичних підходів, що ґрунтуються на диференціюванні методів оптимізації для оптимізації виробничих процесів, що описуються за допомогою таких моделей.

Найбільш доцільно вирішувати задачі оптимізації описаних моделей чисельними методами, такими як статистичний пошук. Для цих цілей необхідно розробити алгоритм глобального статистичного пошуку екстремуму оптимізованих функцій з дискретною зміною аргументів, який би забезпечував оптимальне рух системи у напрямку пошуку нових чергових локальних екстремумів з урахуванням передісторії руху.

Загальна ідея спрямованого статистичного пошуку [167] полягає в тому, що при знаходженні системи у стані X_i у просторі оптимізованих параметрів робиться крок у випадковому напрямку ε . Якщо значення оптимізується, у новому стані (у новій точці пошуку) X_{i+1} , ближче до екстремуму, ніж значення цієї функції в попередній точці X_i , то система переводиться в новий стан X_{i+1} і

наступний крок у випадковому напрямку робиться з попередньої точки X_i .

Основною інформацією, необхідної для статистичної оптимізації, є значення критерію ефективності окремих точках пошуку, т. е. саме ті величини, які можна отримати при моделюванні методом Монте-Карло.

Для виконання кроку у випадковому напрямку суттєво важливим є поняття k^* -вимірний випадковий вектор. Під одиничним випадковим вектором ε у просторі параметрів мається на увазі, слідуючи [16], одиничний вектор, окремі реалізації якого спрямовані: рівномірно у всіх напрямках простору параметрів, тобто цей вектор рівномірно розподілений по всіх напрямках простору параметрів.

Існує кілька методів реалізації випадкового вектору, розглянутих у роботі [5]. Видається доцільним обрати такий метод реалізації випадкового вектора ε , коли його проекціями на осі координат будуть незалежні нормально розподілені випадкові числа. Якщо отримати k^* незалежних випадкових значень нормально розподіленої величини $x_1, x_2, \dots, x_{k^*}$, то напрямок випадкового вектора X , побудованого цих величинах як у складових буде рівномірно розподіленим у сфері (тобто, на безлічі всіх можливих напрямів векторів в k^* -мерном просторі).

Оскільки випадковий вектор визначений як одиничний вектор, це твердження є рівнозначним тому, що проекції випадкового вектора X рівномірно розподілені на поверхні гіперсфери одиничного радіусу ($R=1$).

Для локального статистичного пошуку оптимізації систем управління використовуються метод пошуку з покаранням випадковістю [18], метод статистичного градієнта [12], метод найкращої проби [21].

Основна ідея випадкового пошуку методом статистичного градієнта полягає в тому, що напрямок чергового кроку пошуку вибирається за статистичним градієнтом або, що те саме, у напрямку середньозваженого збільшення функції якості, отриманого в результаті ряду випадкових проб.

Сутність оптимізації з використанням пошуку з покаранням випадковістю полягає у наступному. У просторі оптимізованих параметрів робиться i -й крок у випадковому напрямку ε . Якщо значення функції у новому стані $W(X_{i+1})$ більше (при пошуку максимуму функції), ніж значення $W(X_i)$ у вихідному стані, повторюється крок у тому ж напрямку ε . Якщо ж значення функції у новому стані $W(X_{i+1})$ не збільшилося, то система повертається в початковий стан, звідки робиться наступний пошуковий крок у новому випадковому напрямку, тобто невдача «карається» новою випадковістю.

Статистична оптимізація функції $W=W(X)$ за алгоритмом пошуку методом найкращої проби полягає в наступному. У просторі оптимізованих параметрів із вихідної точки X_i робиться j^* випадкових проб (пробних кроків) $g\varepsilon_1, g\varepsilon_2, \dots, g\varepsilon_{j^*}$ і вибирається напрямок ε^{++} , що призводить до максимального зниження (при пошуку мінімуму) цільової функції

$$W(X_i + g\varepsilon^{++}) = \min_{(j)} \{W(X_i + g\varepsilon_j)\},$$

де $j = 1, 2, \dots, j^*$ - Номер проби; g - масштаб пробного кроку пошуку.

В цьому напрямку ε^{++} робиться ряд робочих кроків до продовження приватного оптимуму в цьому напрямі, після чого виконується процедура вибору нового напрямку випадкового пошуку до перебування оптимуму.

Істотним недоліком розглянутих вище статистичних методів локальної оптимізації полягає у значних витратах машинного часу через необхідність повторного повернення системи у вихідну точку X_i , у разі віддалення від екстремуму, та подальшого вибору нових кроків до досягнення нового стану X_{i+1} , що наближає функцію, що оптимізується, до екстремуму.

Завдання управління виробництвом полягає у синтезі системи управління, що забезпечує найкраще у заданому сенсі наближення фактичної траєкторії руху об'єкта управління y_t до бажаної. Ціль управління y_t' , обмеження на режим руху до мети Y, U та вид показника якості I , Яким оцінюється якість управління, задані ззовні системою вищого рівня управління.

Відхилення фактичної траєкторії руху від бажаної може виникати як внаслідок зовнішніх збурень, що діють, так і через зміни заданої траєкторії. y_t^*

Сутність запропонованого методу [12] полягає в тому, що вибір чергової точки пошуку оптимуму здійснюється не рівноймовірно, а з деякими обмеженнями, внаслідок чого рух системи набуває інерційності і вона проходить повз локальні екстремуми, відзначаючи лише області їх існування. Пройшовши повз чергову область локального екстремуму, система шукає такі найкращі напрями пошуку відносного нових екстремумів, а чи не повертається до вже досліджених. При цьому траєкторія руху системи в процесі пошуку вибирає оптимально в напрямку чергового локального екстремуму з урахуванням передісторії руху.

Нехай показник ефективності функціонування виробництва як складної системи має вигляд

$$W = W(x_1, x_2, \dots, x_{k^*}),$$

де W - Вибраний показник ефективності системи; k^* - загальна кількість параметрів системи.

Нехай ця функція задана в області $\{D\}$, що є k^* -мірним простором, обмеженим k^* -мірним інтервалом $x_{k_{\min}} \leq x_k \leq x_{k_{\max}}$, $k = 1, 2, \dots, k^*$ на функцію $W(X)$ накладено обмеження виду: $R_\lambda(X) \leq b_\lambda$, $\lambda = 1, 2, \dots, \lambda^*$, де b_λ - Відповідне граничне значення.

Для знаходження оптимальної системи потрібно знайти вектор

$X^* = \left(x_1^*, x_2^*, \dots, x_{k^*}^* \right)$, при якому показник ефективності системи набуває мінімального (максимального) значення на безлічі допустимих векторів $W^* = \text{extr} \{W(X)\}$.

Обмеження області вибору чергової точки пошуку здійснюється в такий спосіб (рис. 19).

Нехай $\Pi = (\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{k^*})$ - Вектор пам'яті, напрям якого відповідає максимальній зміні функції якості в попередній період пошуку локального екстремуму. Вибиратимемо точки пошуку, рівномірно розподілені на поверхні k^* -мірної гіперсфери в межах області обмеженої перетином гіперсфери в межах області, обмеженої перетином гіперсфери та k^* -мірного гіперконусу з віссю Π та кутом розкриття 2ψ .

Гіперсфера висунута від початку координат у напрямку Π на відстань $|\Pi|$. Точки пошуку визначаються вибором випадкового спрямування $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{k^*})$.

$$\varepsilon_k = \frac{\Pi_k + gc\varepsilon_k^0}{\sqrt{\sum_{k=1}^{k^*} (\Pi_k + c\varepsilon_k^0)^2}}, \quad k = 1, 2, \dots, k^* \quad (36)$$

$\psi = \arcsin \left[\frac{gc - \varepsilon_0}{|\Pi|} \right]$, де $\varepsilon_0^* = (\varepsilon_{01}, \varepsilon_{02}, \dots, \varepsilon_{0k^*})$ - Поодинокий випадковий вектор, рівномірно розподілений по всіх напрямках простору параметрів; $c \leq 1$ - Постійна, що визначає радіус гіперсфери.

Для $k^* = 2$, $g=1$, $c=0,8$ ситуація показано на рис. 17.

Напрямок чергового робочого кроку, що найвигідніше розташований у обраному гіперконусі пошуку, можна вибрати за допомогою методу статистичного градієнта або методу найкращої проби. У цьому випадку цей вибір проводиться методом статистичного градієнта, основна ідея якого полягає в тому, що напрямок чергового кроку пошуку вибирається за статистичним градієнтом або, що те ж саме, за напрямом середньозваженого збільшення функції якості, отриманого в результаті ряду випадкових проб.

Якщо $W(X)$ - функція, яка залежить від векторного аргументу та у просторі оптимізованих параметрів з вихідної точки X_i робиться j^* випадкових проб, то k -я відповідна вектору Y (вектору, що визначає напрямок і довжину чергового робочого кроку пошуку) найвигіднішим чином розташованого у просторі пошуку матиме вигляд

$$y_k = \sum_{j=1}^{j^*} \varepsilon_{kj} \Delta W_j, \quad (37)$$

де $j=1, 2, \dots, j^*$ - Номер чергової проби для вибору найкращого напрямку пошуку;

$\varepsilon_j = (\varepsilon_{1j}, \varepsilon_{2j}, \dots, \varepsilon_{k^*j})$ – випадковий вектор, сформований для j -ї проби; ε_{kj} – псевдовипадкове нормально розподілене число з нульовим математичним очікуванням та одиничною дисперсією; $\Delta W_j = W(X + g\varepsilon_j) - W(X_j)$ – Збільшення функції при j -ї пробі; g – масштаб пробного кроку пошуку.

Довжина вектору Y визначається виразом $|Y| = \sqrt{\sum_{k=1}^{k^*} (y_k)^2}$, та напрямком k -ї складової вектору Y визначається як

$$\cos \varphi_k = y_k / |Y| \quad (38)$$

Вибір вказаного напрямку y_k при $k^* = 2$ показаний графічно на рис. 21.

$$\text{При цьому } y_1 = \varepsilon_1^{(1)} \Delta W_1 + \varepsilon_1^{(2)} \Delta W_2 = \sum_{j=1}^2 \varepsilon_k^{(j)} \Delta W_j$$

Пропонований алгоритм глобального пошуку подано на рис. 19а 19б.

Оператор 1 здійснює введення вихідної інформації: $w(x)$ – Функція, що підлягає оптимізації (вводиться підпрограмою); $X_0 = (x_{10}, x_{20}, \dots, x_{k^*0})$ – Вихідна точка пошуку; k^* – Число параметрів, під яким проводиться оптимізація; $\{x_{k_{\min}}, x_{k_{\max}}\}$, $k = 1, 2, \dots, k^*$ – межі області завдання оптимізованої функції; c – Постійна визначальна радіус гіперсфери глобального пошуку; $\{\Delta k\}$, $k = 1, 2, \dots, k^*$ – Інтервали дискретності за параметрами; g – масштаб пробних кроків; j^* – Число пробних кроків.

Оператор 2 констатує факт відсутності передісторії.

Оператори 3 та 4 здійснюють вибір вихідної точки пошуку $X_i (i = 0)$ розрахунок значення функції якості $W(X_i)$ для цієї точки.

Оператор 5 починає вибір найкращого напрямку пошуку в межах обраного гіперконусу.

Оператор 6 здійснює вибір для i -го кроку та j -ї проби випадкового вектора $\varepsilon_i^{(j)}$, рівномірно розподіленого у просторі параметрів.

Оператори 7-9 унормують обраний вектор.

Оператори 10-12 формують випадковий вектор у межах обраного гіперконусу виходячи з умови (36).

Оператори 13–18 здійснюють у циклі перевірку відомих обмежень типу $x_{ki} \min \leq x(j) \leq x_{kmax}$ та повернення точки в задану область $\{D\}$

Оператор 19 розраховує значення функції якості в новій $(i + 1)$ -й точці для j -ї проби.

Оператори 20-21 здійснюють накопичення векторної суми y_k за формулою (36).

Група операторів 6–22 працює j^* раз за кількістю випадкових проб, після чого оператори 24-25 розраховують $\cos \alpha_k$ за формулою (3.19)

Оператор 28 здійснює вибір величини робочого кроку з самоналаштуванням: у міру наближення до локального екстремуму кут розкриття конуса зменшується, щоб система не «зав'язла» в цьому локальному екстремумі, а пройшла повз, відзначивши його область, і навпаки, у міру віддалення системи від локального локального екстремуму кут розкриття конуса збільшується, що підвищує ефективність пошуку у новій ще не дослідженій частині області

$$\psi_{\text{пі}} = \begin{cases} 1, \text{ якщо приращення функції положительно (знак "+"),} \\ 0, \text{ в противном случае (знак "-").} \end{cases}$$

Якщо знак збільшення міняється з плюсу на мінус, то очевидно, що система проходить локальний максимум, якщо з мінуса на плюс - локальний мінімум. У цих випадках оператори 42 і 43 фіксують характер екстремуму функції якості (*min* і *max*) координати точок пошуку та номери N, відповідних пройденим областям локальних екстремумів, після чого оператор 44 здійснює перевірку на закінчення пошуку за спеціальною програмою.

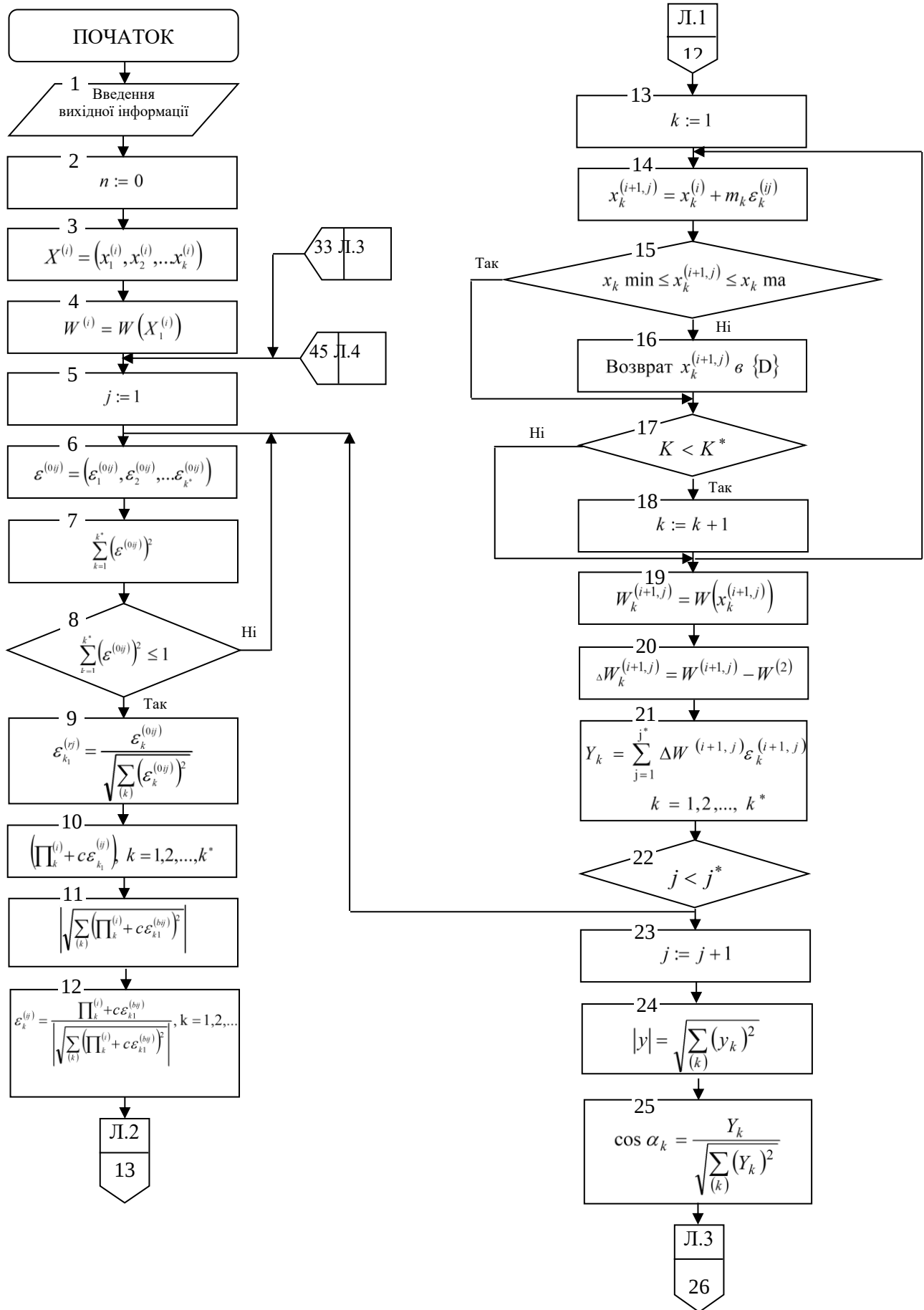
Цьому оператору передається управління і після операторів 37 та 41 у випадках, коли знак ΔW не змінюється, тобто коли система не проходить екстремальної області. Пошук закінчується, коли система проходить всю область завдання функції вздовж одного з параметрів або виконує задану кількість кроків пошуку.

Пропонований метод заснований на використанні відомого алгоритму глобального статистичного пошуку по напрямній сфері. Алгоритм модифікований для оптимізації функцій з дискретною зміною аргументів і внесено додаткові вдосконалення, які прискорюють процес пошуку.

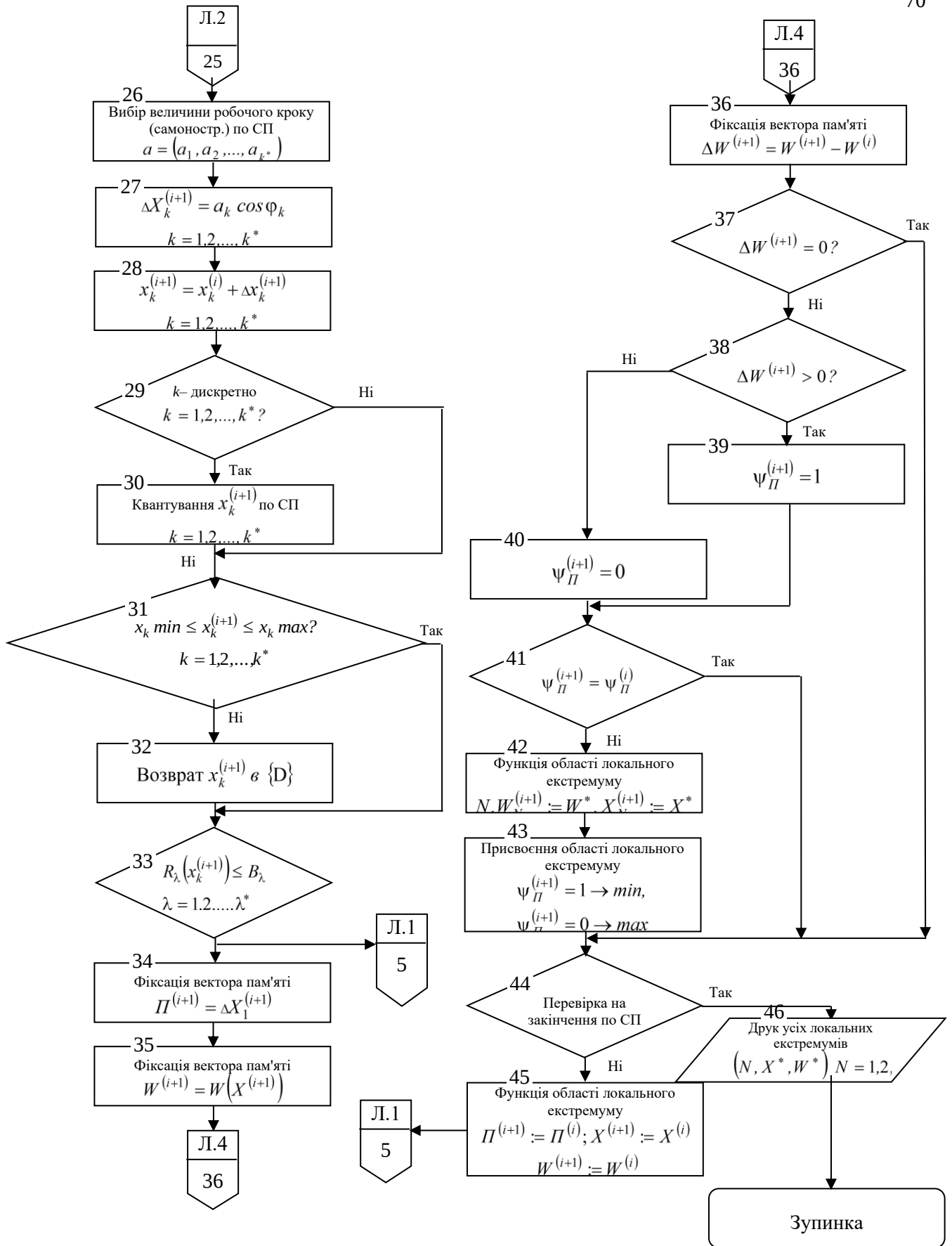
При його використанні вибір чергової точки пошуку оптимуму здійснюється не рівноймовірно, а з деякими обмеженнями, внаслідок чого рух системи набуває інерційності, і вона проходить повз локальні екстремуми, відзначаючи лише області їх існування.

Алгоритми оптимізації багатокритеріальних завдань прийняття рішень із нечіткими цілями

Перехід до ринкових методів господарювання призвів до переведення великої кількості СПП із державного бюджету до розряду самостійних суб'єктів, перед якими виникає набагато більше проблем прийняття раціональних рішень.



Мал. 19а. Алгоритм глобального статистичного пошуку



Мал. 19б Алгоритм глобального статистичного пошуку (продовження)

Величезні масиви інформації, що переробляється, відсутність спеціалізованих стійких алгоритмів, велика відповідальність при прийнятті рішень призводять до необхідності вирішення нових завдань, пов'язаних з розробкою математичних моделей, наукових методів, які дозволяють підвищити ефективність функціонування СПП, що функціонують в умовах невизначеності, що виникає внаслідок неадекватності моделей, мети та критеріїв функціонування окремих підрозділів СПП, прояви зовнішнього середовища. Тому проблема підвищення ефективності та якості підтримки прийняття рішень в управлінні СПП на даний час залишається актуальною і набуває ще більшої гостроти.

Попередній аналіз цієї проблеми [14, 16, 19] показує, що, по-перше, методи прийняття рішень багато в чому визначаються специфікою завдань та способом їх формалізації; по-друге, відсутні дослідження, пов'язані з використанням нечіткого вибору альтернатив за умов невизначеності. Проведений аналіз відомих моделей показав їхню малопридатність для вирішення завдань управління в СПП.

Формально багатокритеріальна задача прийняття рішень з нечіткими цілями [3] може бути описана такими елементами: - множиною допустимих альтернатив $X \subset R^n$ з елементами x ; - безліччю всіх можливих результатів, оцінок альтернатив $X \subset R^m$; - функцією критерію $f(\cdot) \rightarrow Y$, що встановлює зв'язок між альтернативами та їх оцінками: $f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$, $f_i(\cdot) : X \rightarrow R^1, i = 1, 2, \dots, m$; - функціями приналежності $\mu_{c_i} : R^1 \rightarrow I, i = 1, 2, \dots, m$, де I - одиничний відрізок числової прямої, що характеризує переваги особи, яка приймає рішення.

Відповідно до [15] під оптимальним рішенням завдання прийняття рішення з нечіткими цілями розуміється альтернатива

$$x^* \in X : x^* = \arg \max \mu_D(x), \quad (39)$$

де функція приладдя $\mu_D(x)$ визначається формулою:

$$\mu_D(x) = \bigwedge_{i=1}^m \mu_{c_i}(f_i(x)), \quad (40)$$

або

$$\mu_D(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mu_{c_i}(f_i(x)), \lambda_i > 0, \sum \lambda_i = 1. \quad (41)$$

У формулі (41) числа λ_i грають роль коефіцієнтів відносної важливості цілей. Надалі під функціями розумітимемо звуження цих функцій на безлічі $\sup C_i$, тобто

$$\mu_{c_i} = \mu_{c_i} \left| \overline{\sup C_i} \right|, \quad (42)$$

де $\overline{\sup C_i}$ є замикання безлічі $\sup C_i = \{f_i(x) \in R^1 \mid \mu_{c_i}(f_i(x)) > 0\}$.

Припустимо, що безліч $\sup C_i$ є пов'язана безліч у R^1 тобто замкнутий інтервал $[r_i, R_i]$. При цьому припущенні умова (42) еквівалентна наступній системі нерівностей:

$$r_i \leq f_i(x) \leq R_i, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (43)$$

Таким чином, пошук альтернативи, яка задовольняє умови (39) еквівалентний розв'язанню задачі математичного програмування:

$$\mu_D(x) \rightarrow \max, \quad (44)$$

$$r_i \leq f_i(x) \leq R_i, \quad x \in X. \quad (45)$$

Оскільки основним представником завдань прийняття рішень, за умов невизначеності початкових даних, є завдання лінійного програмування, ми обмежимося розглядом випадку, коли функції $f_i(x)$ лінійні: $f_i(x) = \sum_{j=1}^n x_j \alpha_{ij}$.

Нехай коефіцієнти лінійних функцій є нечіткими та характеризуються функціями приналежності $\mu_{A_i}(\alpha_i): R^n \rightarrow I$.

Користуючись поняттям умовної нечіткої множини, визначимо нечітку множину $U_i \subset R^n$ з функцією приладдя

$$\mu_{U_i}(x) = \sup_{\alpha} (\mu_{A_i}(\alpha_i) \wedge \mu_{C_i}(f_i(x, \alpha_i))). \quad (46)$$

З урахуванням нечіткості початкових даних функція власності $\mu_D(x)$ визначається формулою $\mu_D(x) = \bigwedge_{i=1}^m \mu_{U_i}(x)$, або $\mu_D(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \mu_{U_i}(x)$.

Розглянемо задачу (44) для випадку, коли коефіцієнти лінійних функцій з невзаємодіючими нечіткими множинами. У цьому умовні функції власності $\mu_{A_i}(\alpha_i)$ допускають уявлення $\mu_{A_i}(\alpha_i) = \bigwedge_{j=1}^m \mu_{A_{ij}}(\alpha_{ij})$, де $\mu_{A_{ij}}(\alpha_{ij})$ - функція власності виду $\mu_{A_{ij}}: R^1 \rightarrow I$.

$$\text{Нехай, крім цього, при } i \in [1:m], j \in [1:n] \quad \mu_{A_{ij}}(\alpha_{ij}) = \begin{cases} 1, & \alpha_{ij} \in [\underline{\alpha}_{ij}, \bar{\alpha}_{ij}] \\ 0, & \alpha_{ij} \notin [\underline{\alpha}_{ij}, \bar{\alpha}_{ij}] \end{cases}$$

При цих обмеженнях формула (46) набуває вигляду

$$\text{Введемо безліч } K_j \subset R^m: K_j = \{\alpha_i \in R^m \mid \underline{\alpha}_{ij} \leq \alpha_{ij} \leq \bar{\alpha}_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, m\}.$$

Через нечіткість коефіцієнтів лінійних функцій система обмежень може бути описана у вигляді $x_1 K_1 + x_2 K_2 + \dots + x_n K_n \subseteq K(r, R)$, де $K(r, R) = \{y \in R^m | r \leq y \leq R\}$.

При $x \geq 0$ завдання математичного програмування $\mu_D(x) \rightarrow \max$,
$$\begin{cases} x_1 K_1 + x_2 K_2 + \dots + x_n K_n \subseteq K(r, R) \\ x \in X, \quad x \geq 0 \end{cases}$$
, Еквівалентна задачі (44).

Вироблення управлінських рішень доцільно проводити у межах діалогової системи. Вся інформація має зберігатися у БД.

Цінність інформації є основною характеристикою для ухвалення управлінського рішення і може бути виражена через приріст ймовірності оптимального рішення. Якщо для отримання інформації ймовірність оптимального рішення була рівна P_0 , а пізніше постійна P_1 , то цінність $V = \log_2 P_1 - \log_2 P_0 = \log_2 \left(\frac{P_1}{P_0} \right)$.

Методи управління технологічними комплексами при створенні локальних систем управління повинні враховувати інформаційні зв'язки між окремими підсистемами цього технологічного комплексу. Для обчислення оцінки економічності прийняття рішень використовуємо такий вираз $U_y = \sqrt[3]{U_t, U_x, U_\varepsilon}$, де U_y - Оцінка керівника рішення; U_t - Комплексна оцінка ефективності праці (співвідношення досягнутої ефективності роботи до базисної); U_x - господарський ефект (відносини досягнутої величини доходу до базисної); U_ε - економічність (відносини віддачі витрат за управління до базисної).

Для ієрархічних систем управління виробництвом загальні закономірності прийняття рішень можна сформулювати у вигляді функціонального принципу теорії прийняття рішень – принципу послідовного вирішення невизначеності. Даний принцип характеризує рух від загального уявлення про мету, характер діяльності, вимогу функціонування та розвитку керуючої системи про показники її раціональної роботи як цілісності до детального подання завдань. У процесі цього руху кожному рівні уявлення системи, починаючи з вищого, з безлічі допустимих альтернативних рішень для подальшого розгляду відбираються ті, які заслуговують уваги з цілей системи, інші відкидаються і більше розглядаються.

Правильність вибору альтернатив кожному рівні узагальнення перевіряється шляхом їх аналізу кожному, більш детальному рівні представлення стану системи, завдяки чому початкові альтернативи уточнюються, які кількість скорочується. З'являється також можливість кількісної оцінки початкової невизначеності завдання прогнозу $E_{\text{полн}}$ та ступеня її вирішення $E_{\text{ост}}$, які можна обчислити: $E_{\text{полн}} = E_{\text{нач}} + E_T + E_{\text{остат}}$, де $E_{\text{ост}}$ - Залишкова невизначеність рішення; E_T - невизначеність інформації, яка вирішується логічними методами; $E_{\text{нач}}$ - Початкова невизначеність рішення

$E_{ост} = f(I(+))$, де $I(+)$ - Глибина прогнозу.

Разом з $E_{полн}$ і $E_{ост}$ зручно користуватися відносною оцінкою міри якості рішення $R = 1 - \left(\frac{E_{ост}}{E_{полн}} \right)$.

З практичного погляду значення міри якості R полягає в тому, що з її допомогою з'являється можливість порівняння та оцінки ефективності прийнятих рішень або їх окремих елементів.

Синтез стратегії управління задовольняє заданому критерію адаптації та мінімуму критерію якості перехідного процесу

Перспективним напрямом в автоматизації СПП є створення систем, що дозволяють активно здійснювати адаптацію до умов, вимог, що змінюються, цілей.

В результаті аналізу опублікованих робіт, присвячених адаптивним системам [1], нами встановлено, що в них розглядаються питання адаптивної комутації з пріоритетом [1], адаптивної дискретизації з використанням методу найменших квадратів [13] та експоненційних функцій [14], адаптивної ідентифікації [10], синтезу банку алгоритмів адаптації, з метою визначення найбільшого сімейства законів адаптації, що гарантують стійкість адаптивних систем в цілому, серед яких слід вибрати найкращий у сенсі деякого критерію якості.

Серед перелічених та інших відомих робіт відсутні роботи присвячені синтезу стратегії управління що задовольняє критерію адаптації і мінімуму якості перехідного процесу.

Розглянемо деяку систему [22], на яку впливають у кожний момент часу $t = k$ (час t - дискретно) некерований вплив S_k (загалом вектор) і керований вплив U_k (загалом вектор). Вплив S_k , $k = 1, 2, \dots$ є послідовністю незалежних однаково розподілених значень випадкової величини $S \in dF(S / \Theta)$, де $F(S / \Theta)$ - функція розподілу ймовірностей S , що належить параметричному сімейству $\{F(S / \Theta), \Theta \in \Omega\}$.

Функціональна форма $F(S / \Theta)$ - відома, а параметр $\Theta \in \Omega$ (загалом – вектор однозв'язкової області Ω у евклідовому просторі) невідомий. Позначимо через $\varphi(S_k, U_k)$ деяку функцію, що визначає стан поточних втрат системи в k -ом такті. Введемо середню характеристику стану поточних втрат:

$$\bar{\varphi}(U_k, \Theta) = M_{S_k} \{ \varphi(S_k, U_k) \} = \int_{S_k} \varphi(S, U_k) f(S / \Theta) dS,$$

де $M\{\cdot\}$ - оператор математичного очікування щодо випадкової величини S_k ; $f(S / \Theta)$ - Щільність розподілу ймовірностей випадкової величини S .

Протягом певного часу відбувається накопичення інформації у формі результатів спостережень за некерованим впливом S_k .

Нехай S^k - Вектор з компонентами $(S_1, S_2, \dots, S_k)$ - вибірка спостережень обсягом k . Вектор S^{k-1} містить всю інформацію, на основі якої потрібно зробити вибір U_k . Будемо називати S^{k-1} інформаційним станом системи на момент часу k , а функцію виду $U_k = V_k(S^{k-1})$ - Законом управління в k -м такті. Послідовність законів управління $\pi = \{V_1, \dots, V_k, \dots, V_N\}$ назовемо стратегією управління, де N - Довжина інтервалу управління.

Систему вважаємо адаптивною по відношенню до моменту l , якщо з цього моменту, її алгоритм управління виробляє таку стратегію $\pi_l = \{V_l, \dots, V_k, \dots, V_N\}$, яка перекладає при $N \rightarrow \infty$ систему зі стану середніх очікуваних втрат $\bar{\varphi}(V_l(S^{l-1}), \theta)$ у стан $\bar{\varphi}(U^0(\theta), \theta)$ - стан мінімальних очікуваних втрат при оптимальному управлінні $U^0(\theta)$, що визначається в умовах наявності повної інформації про параметр $\theta \in \Omega$. Збіжність $\bar{\varphi}(V_l(S^{l-1}), \theta)$ до $\bar{\varphi}(U^0(\theta), \theta)$ у згаданому вище імовірнісному сенсі є критерієм адаптації. З визначення адаптивності системи слід, що у цьому шляху можна побудувати безліч стратегій управління, у яких система буде адаптивною, т. е. задовольняти заданому критерію адаптації. Проте кожній стратегії π_l відповідають свої очікувані втрати перехідного процесу $W_N(\pi_l) = \sum_{k=l}^N M_{S^{k-1}} \{ \Phi(\bar{\varphi}(V_k(S^{k-1}), \theta), \bar{\varphi}(U^0(\theta), \theta), V_k(S^{k-1}), U^0(\theta)) \}$, де передбачається, що $V_k(S^{k-1})$ обираються відповідно до стратегії π_l , математичне очікування обчислюється щодо випадкового процесу S^{k-1} , $\Phi(\bar{\varphi}(V_k(S^{k-1}), \theta), \bar{\varphi}(U^0(\theta), \theta), V_k(S^{k-1}), U^0(\theta))$ - деякий функціонал, що визначає поточні втрати перехідного процесу k -м такті.

Визначення по S^{k-1} призводить до очікуваних (середніх) втрат перехідного процесу в k -м такті. Таким чином $W_N(\pi_l)$ - критерій якості перехідного процесу наближення від управління l -м такті (за неповною інформацією) до оптимального управління в умовах повної інформації на інтервалі управління довжини N для стратегії π_l .

Поставимо завдання синтезу рівномірно оптимальним (найкращим для кожного k , з усіх можливих стратегій у світлі отримуваної та оброблюваної статистичної інформації) $\pi_l^{\text{опт}}$, яка здійснює переклад системи (у певному вище ймовірнісному сенсі) зі стану $\bar{\varphi}(V_l(S^{l-1}), \theta)$ у стан $\bar{\varphi}(U^0(\theta), \theta)$ при найменших очікуваних втрат перехідного процесу. Іншими словами, необхідно знайти таку стратегію управління $\pi_l^{\text{опт}}$, яка б задовольняла заданому критерію адаптації та доставляла б мінімум заданому критерію якості перехідного процесу на підінтервалі часу довжини N , починаючи з моменту l , тобто. найбільш повно використовувала б одержувану та оброблювану статистичну інформацію.

З літературних джерел [49, 94, 95] відомо кілька підходів до вирішення цієї проблеми: - міні-максний підхід; підхід Вальда; підхід Бернуллі у поєднанні з теоремою Байєса; фідучійний підхід; підхід максимальної правдоподібності.

Підходи міні-максної та максимальної правдоподібності засновані на припущенні, що будь-якому параметру в статистичному завданні рішення може бути приписаний деякий апіорний розподіл, відповідають так званому статистичному байєсовському підходу. Діяльність [4] показано, що з досить загальних умов міні-максний підхід також є байєсовським. Більш того, міні-максний підхід при деяких слабких обмеженнях є байєсовським щодо найменш сприятливого розподілу.

Вразлива сторона підходу Байєса полягає в необхідності постулювати існування апіорного розподілу. Від цього недоліку вільні фідучіальний і підхід максимальної правдоподібності, яким, переважно, і присвячена робота [8].

Проведені нами дослідження показали, що фідучіальний підхід та підхід максимальної правдоподібності не можуть призвести до оптимального вирішення проблеми. Можна отримати раціональний метод вибору (стосовно простоти обробки спостережень та якості перехідного процесу) апіорного розподілу для байєсовського підходу у разі використання його в задачах синтезу алгоритмів адаптивного управління.

У роботі пропонується новий підхід, що базується на модифікованій основі, сутність якого розглянемо на конкретному прикладі.

Нехай $f(S/\Theta) = \frac{1}{\Theta} \exp\left\{-\frac{S}{\Theta}\right\}$, $0 < S < \infty$ (Щільність експоненційного розподілу), $\varphi(S_k, U_k) = (U_k - S_k)^2$,

$$Z_{k-1} = t_{k-1} = \sum_{i=1}^{k-1} S_i, \Phi(\varphi(\omega_k(\hat{\theta}, \alpha_k), \Theta), \bar{\varphi}(U^0(\Theta), \Theta), \omega_k(\hat{\theta}_k, \alpha_k), U^0(\Theta))) =$$

$$= \bar{\varphi}(\omega_k(\hat{\theta}_k, \alpha_k), \Theta).$$

Рішення:

1. Вибірковий розподіл $Z_{k-1} = t_{k-1}$:

$$dP(t_{k-1}/\Theta) = \frac{1}{T(k-1)\Theta^{k-1}} t_{k-1}^{k-2} \exp\left\{-\frac{t_{k-1}}{\Theta}\right\} d\Theta, 0 < t_{k-1} < \infty.$$

2. Фідучійний розподіл параметра Θ :

$$dP^*(\Theta/t_{k-1}) = \frac{t_{k-1}^{k-1}}{T(k-1)} \left(\frac{1}{\Theta}\right)^k \exp\left\{-\frac{t_{k-1}}{\Theta}\right\} d\Theta, 0 < \Theta < \infty.$$

3. Фідучійна оцінка густини розподілу ймовірностей S_k :

$$f^*(S_k/t_{k-1}) = \frac{k-1}{t_{k-1}} \left(1 + \frac{S_k}{t_{k-1}}\right)^{-k}, 0 < S_k < \infty.$$

4. Модифікована фідучіальна оцінка щільності розподілу ймовірностей

$$S_k : f^*(S_k/t_{k-1}, \alpha_k) = \frac{k-1+\alpha_k}{t_{k-1}} \left(1 + \frac{S_k}{t_{k-1}}\right)^{-k-\alpha_k}, 0 < S_k < \infty.$$

5. Оптимальна функція $\omega_k^*(t_{k-1}, \alpha_k)$ з умови:

$$\text{знайти } \min_{U_k} \int_0^\infty (U_k - S)^2 \frac{k-1+\alpha_k}{t_{k-1}} \left(1 + \frac{S}{t_{k-1}}\right)^{-k-\alpha_k} dS,$$

$$\text{отримуємо } \omega_k^*(t_{k-1}, \alpha_k) = \frac{t_{k-1}}{k-2+\alpha_k};$$

6. Оптимальний параметр α_k^0 з умови: знайти $\min_{\alpha_k, t_{k-1}} M\{\bar{\varphi}(\omega_k^*(t_{k-1}, \alpha_k), \Theta)\}$,

$$\text{де } \bar{\varphi}(\omega_k^*(t_{k-1}, \alpha_k), \Theta) = \frac{t_{k-1}^2}{(k-2+\alpha_k)^2} - 2 \frac{t_{k-1}}{(k-2+\alpha_k)} \Theta + 2\Theta^2, \text{ отримуємо } \alpha_k^0 = 2.$$

7. Оптимальне керування $U_k^0(t_{k-1})$ в k -м такті: $U_k^0(t_{k-1}) = \frac{t_{k-1}}{k}$.

8. Оптимальна стратегія управління на базі інформативної статистики

$$z = t : \pi_l^{\text{опт}}(t) = \left\{ \frac{t_{l-1}}{l}, \dots, \frac{t_{k-1}}{k}, \dots, \frac{t_{N-1}}{N} \right\}.$$

При цьому досягається досить суттєве покращення якості перехідного процесу наближення від управління в умовах неповної інформації до оптимального управління в умовах повної інформації.

Перевага запропонованого підходу у тому, що дозволяє також досить легко визначати рівномірно оптимальні стратегії управління за наявності обмежень на управління.

У цьому випадку використовуються оптимальні модифіковані оцінки фідуціальних щільностей $f^*(S_k/Z_{k-1}, \alpha_k^0)$, $k = l(1)N$, при цьому з'являється можливість вказати раціональне (стосовно простоти обробки спостережень та якості перехідного процесу) апіорний розподіл для байєсовського підходу. У цьому усувається суб'єктивний момент під час виборів підходу.

Використання запропонованого модифікованого підходу сприятиме підвищенню якості алгоритмів адаптивного управління виробництвом і функціонування існуючих.

Спосіб адаптивної алгоритмізації завдань розрахунку виробничих програм для СПП

Основою економічного розрахунку промислових підприємств є планування. До найактуальніших завдань, у сфері планування, ставляться завдання розрахунку виробничих програм, дають оптимальні чи близькі до оптимальним (за обраними критеріями) техніко-економічні і оперативні плани, багато з яких є цілими задачами з Булевими змінними.

Як правило, для вирішення завдань такого типу застосовуються методи відшукування точного рішення або наближені методи цілісного програмування, пов'язані з різними схемами впорядкованого перебору, які заздалегідь обумовлюються, тобто складаються згідно з деякими жорсткими програмами перебору. Як впливає з аналізу літературних джерел [18, 24, 17], для

вирішення завдань такого типу найчастіше застосовується метод гілок та кордонів. Однак ефективність роботи алгоритму, заснованого на даному методі, суттєво залежить від того, наскільки вибір конкретного методу відображає специфіку задачі.

Згідно [14, 16], в даний час накопичено досвід застосування ймовірнісних методів для вирішення задач планування. Ймовірнісний підхід до вирішення (нелокальних) завдань дозволяє багато алгоритмів інтерпретувати в рамках звичайної локальної схеми (типу градієнтної), правда вже для деякого наближеного (усередненого) завдання. Цей факт дає змогу вказати певний варіаційний підхід для формування ймовірнісних ітераційних алгоритмів розв'язання дискретних завдань.

Наукова завдання полягає у створенні гнучкої схеми перебору, що дозволяє перебудовувати їх у процесі пошуку рішення з урахуванням поточної інформації, тому метою було виявлення умов штучного залучення випадковості, що дозволяє формалізувати бажану схему перебору, коли він відбувається свого роду навчання перебору, пристосованого до специфіки цієї задачі.

Досягнення поставленої мети у роботі [21] вирішувалися такі:

- переходу до опосередкованого завдання оптимізації з булевими змінними на основі рандомізації змінних;
- завдання ітеративного руху у безлічі випадкових векторів.

Наукова новизна полягає в адаптивній алгоритмізації завдань із булевими змінними.

Перехід до посередньої задачі з булевими змінними: $\psi(x) \rightarrow \max_x$, $x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$, $0 \leq x_j \leq 1$; x – ціле, на основі рандомізації змінних дозволяє отримати деякий аналог методу гілок та кордонів.

Отже, розглянемо завдання $M\psi(x) \rightarrow \max_x$, де x – випадковий вектор із щільністю розподілу $P_x(t)$, реалізації якого задовольняють вимоги $0 \leq x_j \leq 1$ $j = 1, 2, \dots, n$.

Задамо ітеративний рух у безлічі випадкових векторів у вигляді

$$x^N = x^{N-1} + \alpha^N \omega^N, \quad (47)$$

де ω^N - випадковий вектор, що визначає напрямок руху; α^N - величина кроку у напрямку ω^N .

Визначаючи далі напрямок руху за допомогою правила локального поліпшення $M_x^N \Phi(x, \lambda) - M_x^{N-1} \Phi(x, \lambda) > 0$, де $\Phi(x, \lambda)$ - функція Лагранжа, отримуємо запис правила локального покращення у вигляді, що дозволяє мати різні записи алгоритму (47) у відповідних ймовірнісних характеристиках. Так виходять алгоритми, що працюють лише з реалізаціями випадкових векторів, або алгоритми, що передбачають зміну параметрів випадкових генераторів векторів.

Застосуємо описану вище схему імовірнісних алгоритмів до задачі лінійного програмування з змінними булевими $\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^{r_j} c_j^k x_{jk} \rightarrow \min_x$, при обмеженнях:

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^{r_j} a_{ij} x_{jk} \geq b_i, i = 1, 2, \dots, m,$$

$$\sum_{k=1}^{r_j} x_{jk} = 1, j = 1, 2, \dots, n,$$

$$0 \leq x_{jk} \leq 1; x - \text{ціле}, j = 1, 2, \dots, n, k = 1, 2, \dots, r_j.$$

Зв'яжемо з цим завданням відповідну функцію Лагранжа і перейдемо до ймовірнісної постановки завдання:

$$\Phi(x, \lambda) = \sum_j \sum_k c_j^k x_{jk} + \sum_i \lambda_i \left(b_i - \sum_j \sum_k a_{ij} x_{jk} \right) \rightarrow \min,$$

де $x = [x^1, x^2, \dots, x^n]$ - блочне представлення векторів, причому

$$x^j = (x_{j1} x_{j2}, \dots, x_{j, r_j}), 0 \leq x_{jk} \leq 1; x - \text{ціле}, k = 1, 2, \dots, r_j, \quad (48)$$

$$\sum_k x_{jk} = 1, j = 1, 2, \dots, n. \quad (49)$$

тобто. до завдання виду $M_x \Phi(x, \lambda) \rightarrow \min$, де x - випадковий вектор, реалізації якого задовольняють вимогам (48), (49) і який має деяку щільність розподілу $P_x(\tau)$.

Задаватимемо рух у просторі випадкових векторів ітеративною формулою

$$x^N = \bar{U}^N x^{N-1} + U^N y^N, \quad (50)$$

де y^N - випадковий вектор, визначальний напрямок руху, що його реалізації задовольняють вимогам (48), (49), тобто. $y = [y^1, y^2, \dots, y^n]$, $y^j = (y_{j1} y_{j2} y_{j3}, \dots, y_{n, r_j})$,

$0 \leq y_{jk} \leq 1, k = 1, 2, \dots, r_j, \sum_k y_{jk} = 1$, із щільністю розподілу $P_y(S)$. U - Бульова випадкова величина така, що $P(U = 1) = P_u, P(U = 0) = q_u$.

Будемо, як і раніше, визначати напрямок руху, виконуючи правило локального поліпшення у вигляді $M_x^N \Phi(x, \lambda) - M_x^{N-1} \Phi(x, \lambda) < 0$.

Розпишемо докладніше $M_x^N \Phi(x, \lambda)$:

$$\begin{aligned} M_x^N \Phi(x, \lambda) &= \int \Phi(t, \lambda) \delta(t - \bar{\mu}\tau - \mu s) P_u^N(\mu) P_x^{N-1}(\tau) P_y^N(S) d\mu d\tau ds dt = \\ &= P_u^N \int \Phi(S, \lambda) P_y^N(S) dS + q_u^N \int \Phi(\tau, \lambda) P_x^{N-1}(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

Тоді різниця $M^N \Phi - M^{N-1} \Phi$ запишеться так:

$$M_x^N \Phi(x, \lambda) - M_x^{N-1} \Phi(x, \lambda) = P_u^N \int [\Phi(S, \lambda) - \Phi(\tau, \lambda)] P_y^N(S) P_x^{N-1}(\tau) d\tau ds.$$

$$P_u^N = M_u^N, \int \Phi(S, \lambda) P_y^N(S) dS = M_y^N \Phi(y, \lambda),$$

Зауважимо, що $\int \Phi(\tau, \lambda) P_x^{N-1}(\tau) d\tau = M^{N-1} \Phi(x, \lambda)$, і, отже, через незалежність випадкових векторів y і x

$$M_x^N \Phi - M_x^{N-1} \Phi = M_u^N M_y^N M_x^{N-1} \{u[\Phi(y, \lambda) - \Phi(x, \lambda)]\} < 0.$$

При цьому

$$\Phi(y, \lambda) - \Phi(x, \lambda) = \sum_j \sum_k \left(c_j^k - \sum_i \lambda_i a_{ij}^k \right) (y_{jk} - x_{jk}).$$

Таким чином, завдання полягає у визначенні випадкового вектору y^N , такого, що

$$M_u^N M_y^N M_x^{N-1} \left\{ u \sum_j \sum_k \left(c_j^k - \sum_i \lambda_i a_{ij}^k \right) (y_{jk} - x_{jk}) \right\} < 0. \quad (51)$$

Булева випадкова величина U першому рівні роботи алгоритму не змінюється, тобто. $P_u^N = P_u^{N-1}$, $N = 1, 2, \dots$

Залежно від виконання операції опосередкування по випадковим змінним нерівності (51) тут, як і раніше, можна отримувати різні типи алгоритмів, що працюють як з реалізаціями випадкових векторів, так і з ймовірнісними характеристиками. Так, не проводячи операції зосередження, отримаємо алгоритм, що працює лише з реалізаціями випадкових векторів. При цьому можна визначити y^N так, щоб максимально гарантувати виконання нерівності (51). З цією метою припустимо, що

$$\begin{aligned} y_{js}^N &= 1, \text{ якщо } c_j^S - \sum_i \lambda_i a_{ij}^S = \min_k \left[c_j^k - \sum_i \lambda_i a_{ij}^k \right], \\ y_{ji}^N &= 0 \text{ для всіх } i = 1, 2, \dots, r_j, i \neq S. \end{aligned}$$

Рух (50) розуміється у разі як дію над реалізаціями випадкових векторів.

Виконуючи операцію опосередкування в нерівності (51) по Бульовій випадковій величині U , а також випадковому вектору u , отримаємо запис умови локального поліпшення у вигляді

$$M_x^{N-1} \left\{ P_u^N \sum_j \sum_k \left(c_j^k - \sum_i \lambda_i a_{ij}^k \right) \left(\Pi_{jk}^N - x_{jk} \right) \right\} < 0,$$

де $\Pi_{jk} = P(y_{jk} = 1)$.

Визначимо змінні P_u^N і Π_{jk}^N наступним чином: $P_u^N = P_u^{N-1}$, $N = 1, 2, \dots, \Pi_{jS}^N = 1$, якщо $c_j^S - \sum_i \lambda_i a_{ij}^S = \min_k \left[c_j^k - \sum_i \lambda_i a_{ij}^k \right]$, $\Pi_{ji}^N = 0$, для всіх $i \neq S$.

Рух (50) здійснюватимемо у разі у ймовірнісних характеристиках. Позначимо через P_{jk} ймовірність того, що випадкова величина x_{jk} приймає значення, що дорівнює одиниці: $P_{ik} = P(x_{jk} = 1)$. Тоді запишемо рух (50) запишемо у вигляді $P_{ik}^N = q_u^N P_{ik}^{N-1} + P_u^N \Pi_{ik}^N$, $k = 1, 2, \dots, r_j$.

У нашому випадку

$$P_{iS}^N = q_u^N P_{iS}^{N-1} + P_u^N, P_{ji}^N = q_u^N P_{ik}^{N-1}, i \neq S. \quad (52)$$

Після проведення опосередкування за всіма випадковими змінними, присутніми в нерівності (51), маємо

$$\begin{aligned} P_u^N \sum_j \sum_k \left(c_j^k - \sum_i a_{ij}^k \lambda_i \right) \left(\Pi_{jk}^N - P_{ik}^{N-1} \right) &< 0 \\ P_u^N \sum_j \sum_k \left(c_j^k - \sum_i a_{ij}^k \lambda_i \right) \left(\Pi_{jk}^N - P_{ik}^{N-1} \right) &< 0 \end{aligned}$$

Вважаючи $P_u^N = P_u^{N-1}$, $N = 1, 2, \dots$ можна визначити Π_{jk}^N з наступних умов:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{r_j} \Pi_{jk}^N &= 1, j = 1, 2, \dots, n \\ P_{jS}^{N-1} &< \Pi_{iS}^N \quad \forall S : c_j^S - \sum_{i=1}^m a_{ij}^S \lambda_i < 0, \\ P_{jS}^{N-1} &> \Pi_{i\ell}^N \quad \forall \ell : c_j^\ell - \sum_{i=1}^m a_{ij}^\ell \lambda_i > 0, \end{aligned}$$

при цьому рух здійснюється за (52).

Штучне залучення випадковості дозволяє формалізувати бажану схему перебору. При цьому відбувається своєрідне навчання перебору, пристосованого до специфіки цього завдання.

Адаптивна модель процесу стратегічного планування СПП із нестійкими умовами реалізації стратегії

Адаптивність стратегії, як властивість пристосування до умов її реалізації, визначається областю маневрування, під якою будемо розуміти безліч ресурсів, на основі яких робиться розрахунок і (або) коригування стратегії. Частина області маневрування співпадатиме з областю допустимих значень стратегії. Чим більша область маневрування R тим паче ефективним буде коригування стратегії у разі зміни умов її реалізації, і що більш вузька область маневрування, тим менше можливостей для коригування стратегії.

Оптимальна область маневрування визначається вирішенням наступного завдання стохастичного програмування:

$$R^* = \text{Arg min} \left\{ F(R) = M_{\theta} \sum_{S=1}^S f_s(R, \theta) \mid R \geq \underline{R} \right\}, \quad (53)$$

де M_{θ} - Знак математичного очікування; $R^* = \{R_s^*\}$, $S = \overline{1, S}$ - Вектор оптимальної області маневрування з урахуванням непрямого резерву; $R = \{R_s\}$, $S = \overline{1, S}$ - Вектор обсягу ресурсів, необхідний для виконання обов'язкової частини стратегії СПП $\underline{R}_S = \sum_{j=1}^N a_{sj} \underline{X}_{js}$, $S = \overline{1, S}$, де $\underline{X}_j$ - Обов'язкова частина стратегії з виробництва продукції.

Вираз (53) $F(R)$ - Не диференційована функція, причому:

$$f_s(R, \theta) = \sum_{S=1}^S \max \{ \bar{\alpha}_s (R_s - \theta_s), \beta_s (\theta_s - R_s) \},$$

де $\theta = \{\theta_s\}$, $S = \overline{1, S}$ - Випадковий вектор використання S -го ресурсу; $\bar{\alpha}_s$ - питомі витрати через надлишок S -го ресурсу; $\bar{\beta}_s$ - питомі витрати через дефіцит S -го ресурсу

Розв'язанням задачі (53) можна визначити і оптимальну область маневрування за виробничими потужностями, де $\bar{\alpha}_f$ - питомі витрати через простої f -ї групи обладнання, $\bar{\beta}_f$ - питомі витрати через дефіцит або наднормативні надлишки використання f -ї групи обладнання.

Оптимальна область маневрування [12, 14, 18] повинна бути узгоджена з виробничою стратегією, тобто повинна розраховуватися на основі оптимальної області маневрування R^* . Однак розрахунок плану, що забезпечує максимально повне використання області R^* і випуск найприбутковішої продукції, є складне завдання узгодження. У кожному конкретному випадку питання узгодження оптимальної галузі маневрування зі стратегією випуску можуть вирішуватися по-різному, залежно від місії та цілей виробничо-економічної системи. Тому стратегія по-різному може бути узгоджена з оптимальною областю маневрування.

Збільшення адаптивних якостей стратегічних планів безпосередньо з удосконаленням системи критеріїв стратегічного планування і управління. У випадку завдання синтезу стратегії поведінки СПП, є багатокритеріальною завданням оптимізації. Дуже важливим є обґрунтування системи критеріїв ефективності [15, 16] та відповідних економічних показників, що відображають якість функціонування СПП, а також ефективність адаптації до зміни цільових установок плану (критеріїв оптимальності).

Стратегія, розрахована за одним критерієм оптимальності, має значно гірші маневрені якості, ніж багатокритеріальна стратегія [16, 19]. Доказ цього твердження очевидний і ґрунтується на законі необхідного розмаїття. Проблема багатокритеріальності при адаптивному стратегічному плануванні полягає в тому, що обране стратегічне рішення має бути інваріантним за зміни вектора переваги.

Аналіз зарубіжного досвіду та узагальнення вітчизняного досвіду функціонування СПП [22] дозволяє виділити такі локальні стратегічні цілі: прибутковість, ринки, продуктивність, продукція, фінансові ресурси, виробничі потужності, дослідження та впровадження нововведень, організація трудових ресурсів, соціальна відповідальність.

Для класу СПП з нестійкими умовами реалізації стратегії одним із найактуальніших критеріїв є критерій максимального використання оптимальної галузі маневрування плану. Чим більший вплив факторів, що дестабілізують, на систему, тим більшої актуальності набуває цей критерій у сукупності з іншими критеріями, наприклад максимумом прибутку. У свою чергу, чим більший рівень використання оптимальної області маневрування, тим більша глибина адаптивності стратегії.

Міра глибини адаптивності стратегії повинна відображати роздільний вплив кожної характеристики області маневрування: маневрування на основі зміни допустимого значення стратегії; маневрування з урахуванням зміни цільових установок плану.

Для цього введемо поняття загальної глибини адаптивності стратегії, що визначається парою:

$$H = \langle H^*, \tilde{H} \rangle, \quad (54)$$

де H - загальна глибина адаптивності стратегії; $\tilde{H}$ - Глибина адаптивності по області допустимого значення стратегії; H^* - глибина адаптивності щодо зміни цільових установок стратегії.

У виразі (54) $\tilde{H}$ визначається виразом:

$$\tilde{H} = \prod_{s=1}^S H_s, \quad H_s = \min \left\{ \frac{R_s^{**}}{R_s^*}, 1 \right\}, \quad S = \overline{1, S} \quad (55)$$

де R_s^{**}, R_s^* - оптимальна область маневрування відповідно до та після

погодження зі стратегією СПП.

При зміні глибини адаптації, при зміні цільових установок стратегії передбачається, що існує більше однієї цільової функції і існує можливість зміни вектора переваг у межах цих функцій у відомих межах.

Нехай вирішується багатокритеріальне завдання пошуку точки розв'язання X^* з області Ω . λ – сукупність векторів переваг даних критеріїв f_i ,

$i = \overline{1, m}$ – метричний простір $\left(\lambda \in \wedge / \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0 \right)$.

Позначимо R^* наступним чином: $\lambda \subset R^*$, причому: $R^* \subset R^+$, $r \in R^* : \underline{r}_i \leq r_i \leq \bar{r}_i$, $i = \overline{1, m}$, де $\underline{r}_i, \bar{r}_i$ – відповідно мінімально та максимально допустимі значення компонентів вектора переваг, причому може виконуватися умова:

$$\sum_{i=1}^m r_i > 1 \quad (56)$$

Знак « $\Rightarrow$ » (56) означає наявність одного вектора λ зі значенням компонент рівних $1/m$. У загальному випадку точки $\lambda_i \in \wedge$ віддалені в середньому на однакові відстані, як від точки $\underline{r}$, так і від точки $\bar{r}$.

Здатність СПП до реагування на зміни λ означає, що обране рішення X^* стратегії має породжувати в області R^* такий вектор λ відносно відстані від якого до точок $\underline{r}, \bar{r}$ мінімальні та однакові (майже однакові). Це забезпечить найбільше зближення у просторі Ω крапки X^* з точками, що відповідають допустимим вектором переваг.

Таким чином, глибина адаптації H^* стратегії, обраної з урахуванням багатокритеріальності на заданій галузі $\wedge$, Розраховується за формулою:

$$H^* = \underline{H} / \bar{H} \leq 1, \quad (57)$$

де
$$\underline{H} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \underline{r}_i H_i^*, \quad (58)$$

$$\bar{H} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \bar{r}_i H_i^*. \quad (59)$$

У виразах (56) – (59) H_i^* – індивідуальні критеріальні оцінки глибини адаптації стратегії, причому:

$$H = \begin{cases} 1 - \frac{f_i^* - f_i^{**}}{f_i^{**} - f_i^*}, & i \in I_1 \\ 1 - \frac{f_i^{**} - f_i^*}{f_i^* - f_i^{**}}, & i \in I_2 \end{cases}, \quad (60)$$

де I_1, I_2 - безліч функцій, які максимізуються та мінімізуються, відповідно,
 $f_i = \max_{x \in \Omega} f_i(X), \quad i = \overline{1, m}.$

Частина i -го критерію H_i^* при розрахунку глибини адаптації визначається за такою формулою:

$$H_i^* = \frac{r_i H_i}{\sum_{i=1}^m \bar{r}_i H_i^*}. \quad (61)$$

Таким чином (56) – (61) видно, що впливати на глибину адаптації можна через керовані параметри $\underline{r}_i, \bar{r}_i, H_i^*$.

Індивідуальні оцінки H_i^* при цьому визначаються заданим вектором переваги $\lambda_i, i = \overline{1, m}$. що породжує точку вирішення багатокритеріальної задачі. З виразів (56) – (61) видно, що глибину адаптації можна збільшити з допомогою звуження області $\wedge$ що призводить до зближення граничних точок. Якщо область $\wedge$ задано жорстко, глибина адаптації залежатиме від оцінок H_i^* , Зміна яких можливо здійснити завданням нового вектору переваги.

При реалізації алгоритму вирішення багатокритеріальної задачі збільшення глибини адаптації плану досягається на кожному кроці шляхом надання більшого рівня пріоритету тим критеріям, часткова участь яких у H_i^* мінімально. При цьому вирішується завдання: $\min \underline{r}_i H_i^*, \quad i = \overline{1, m}$.

З умов (60) видно, що $H_i^* \in [0, 1]$, причому чим ближче значення H_i^* до одиниці, тим паче адаптивні якості плану. Таким чином, при заданому діапазоні допустимих змін вектору переваг, пошук рішення, що має адаптивні якості, повинен супроводжуватися максимізацією значення H_i^* .

Існуючі алгоритми вирішення багатокритеріальних завдань по-різному сприяють виконанню вимог адаптації обраної стратегії щодо умов завдання переваг на безлічі цільових функцій. У цьому випадку найбільш перспективними є ті з них, які ґрунтуються на інтерактивних процедурах, за якими на кожному кроці виконання особа, яка приймає рішення (ЛПР), може змінити вектор переваг. Алгоритм, в основі якого закладена ідея звуження області парето-оптимальних рішень, дозволяє на кожному кроці заглибитися в цю область, виконуючи при цьому наведені вище вимоги адаптації.

У процесі реалізації стратегії дуже важливим аспектом є постійний моніторинг відхилень фактичних результатів функціонування від стратегічних цілей, з урахуванням яких виконується процес прийняття рішень коригування СПП. На практиці таке коригування найкраще проводити, розподіляючи стратегію на менші планові періоди.

Отже, коригування стратегії фактично виконується лише на рівні тактичного планування виробництва. У зв'язку з тим, що процес розподілу, згідно з логікою системного підходу, має безперервний характер, коригування стратегії має також безперервний характер.

Під час коригування стратегії виробничо-економічної системи виконується реалізація закладених у стратегії адаптивних якостей. У цьому відбувається розподіл області маневрування стратегії за плановими періодами, що, природно, висловлює специфіку математичної постановки завдання розподілу. Т.о., оптимальну адаптивну стратегію X^* необхідно розподілити на менші періоди, тобто здійснити перехід від стратегічного планування до тактичного планування та управління СПП.

Нехай $X^*(t)$, $t = \overline{0, T}$ - стратегія СПП, розподілена на періоди $[t, t+1]$ яка може бути отримана різними способами, наприклад, за допомогою рішення наступного завдання:

$$\sum_{t=0}^{T-1} X(t) \rightarrow \max, \quad (62)$$

$$X(t) \in X, \quad (63)$$

де X – допустима сфера визначення стратегії $X(t)$.

З розв'язання задачі (4.20) – (4.21) випливає визначення оптимальної області маневрування в період $[0, t]$:

$$R^*(t) = \sum_{k=0}^t R(X^*(k)), \quad R(0) = 0, \quad t = \overline{0, T}, \quad (64)$$

де $R^*(t)$ -оптимальна область маневрування на період; $R(X^*(k)) = \{R_s(X^*(k)), S = \overline{1, S}\}$, причому $R_s(X^*(k)) = A_s X^*(k)$, $S = \overline{1, S}$, $r = \overline{0, t}$, $t = \overline{0, T}$.

Дотримуючись термінології теорії оптимального управління обсяг ресурсів, що використовуються протягом періоду $[0, t]$, $R(t) = \{R_s(t)\}$, $S = \overline{1, S}$ - стан об'єкта управління на період часу $[0, t]$. Величина $R^*(t)$ буде заданою (детермінованою) траєкторією поведінки об'єкта управління у період $[0, t]$.

Під $X(t)$, $t = \overline{0, T}$ розумітимемо в даному випадку розподілену стратегічну програму на період $(t, t+1)$, тобто під $X(t)$ розуміється управління на період $(t, t+1)$.

Таким чином, маємо СПП, поведінка якої може бути описана наступною системою рівнянь:

$$R(t+1) = R(t) + BX(t) + \Theta(t), \quad R(0) = 0, t = \overline{1, T}, \quad X(0) = \Theta(0) = 0 \quad (65)$$

План $X(t)$ належить допустимій області X :

$$B_f X_j(t) \leq A(t), \quad t = \overline{0, T-1}, \quad (66)$$

$$\underline{X}(t) \leq X(t), \quad t = \overline{0, T-1}, \quad (67)$$

$$X^* = \sum_{t=0}^{T-1} X(t). \quad (68)$$

Як критерій оптимальності в задачі розподілу стратегії за плановими періодами з урахуванням ймовірності природи функціонування СПП доцільно взяти мінімум очікуваного відхилення від оптимальної адаптивної стратегічної траєкторії поведінки системи $R^*(t)$, $t = \overline{0, T}$:

$$\min F(X(0), \dots, X(T-1)) = M_f(R(0), \dots, R(T), X(0), \dots, X(T-1), \Theta(0), \dots, \Theta(T-1)) \quad (69)$$

де $f(R(t), X(t), \Theta(t)) = \max_{0 \leq t \leq T} \|R(t) - R^*(t)\|$; M - Знак математичного очікування; $\|$ - евклідова норма, яка показує максимальне за модулем відхилення координат.

У загальному вигляді модель завдання розподілу виробничої стратегії за плановими періодами, враховуючи (65) – (69), має вигляд:

$$\min F(X(0), \dots, X(T-1)), \quad R(t+1) = R(t) + Bx(t) + \Theta(t), \quad R(0) = 0, \quad t = \overline{0, T}, \quad X(t) \in X.$$

Методологія реалізації адаптивного автоматизованого пошуку оптимальних альтернатив прийнятих рішень

Для сучасного рівня розвитку систем управління СПП характерним є те, що більшість завдань управління та планування вирішується в умовах невизначеності, неточності та недостатності інформації про процеси та умови функціонування виробництва, про вплив зовнішнього середовища. При розробці моделей та алгоритмів, інформаційних технологій необхідно використовувати всі ці фактори та розглядати роботу виробничих систем в умовах невизначеності.

Існуючий рівень розвитку систем підтримки прийняття рішень (СППР) за умов невизначеності не задовольняє вимогам виробничих систем щодо адаптивності, ефективності, інформативності, адекватності. Це пов'язано насамперед з обмеженими можливостями алгоритмічного підходу. Процеси управління виробничими системами за умов невизначеності не піддаються апіорної алгоритмізації. Підвищити показники якості СППР за умов невизначеності можна шляхом використання підходів, в основі яких лежать логічні моделі підтримки прийняття рішень, що базуються на апараті нечітких множин [96, 102].

Попередній аналіз цієї проблеми показує, що, по-перше, методи прийняття рішень багато в чому визначаються специфікою завдань та способом їхньої формалізації; по-друге, відсутні дослідження, пов'язані з використанням нечіткого вибору альтернатив за умов невизначеності. Більшість робіт [15, 18, 19] присвячені методам, які не враховують невизначеність, що виникають у процесі управління виробничими системами.

Тому з метою підвищення ефективності та якості підтримки прийняття

рішень в умовах невизначеності наші дослідження [25] були спрямовані на розробку адаптивних методів та моделей прийняття рішень.

Досягнення поставленої мети у роботі вирішувалися такі:

- формалізація математичної моделі прийняття рішень;
- розробка системи прийняття рішень в управлінні виробництвом (СПРУП) для реалізації СППР з використанням математичного апарату нечітких множин.

Наукова новизна запропонованих рішень полягає у використанні, для реалізації окремих етапів процесу прийняття рішень в умовах невизначеності, математичного апарату на основі нечітких множин, що дозволяє вирішувати широке коло завдань щодо підвищення діяльності підприємств на етапі їх подальшого розвитку.

У випадку прийняття рішення можна визначити як перетворення інформації стану в кількісні чи якісні складові інформації управління. Якість процесу прийняття рішень перебуває у прямої залежності від повноти обліку всіх чинників, важливих для наслідків прийнятих рішень. Часто ці фактори мають суто суб'єктивний характер, властиві як особі, яка приймає рішення (ЛПР), так і будь-якій системі прийняття рішень. ЛПР часто вимушено діяти в умовах невизначеності, тобто в умовах відсутності необхідної кількості інформації для цілеспрямованої організації його дій у процесі прийняття рішень.

Існують різні види невизначеності. Не претендуючи на повноту, можна вказати на такі, що найчастіше зустрічаються:

- невизначеність, викликана нестачею інформації, її достовірності з технічних, соціальних та інших причин;
- невизначеність підходів ЛПР, через брак його досвіду та знання факторів, що впливають на прийняття рішень;
- невизначеність, пов'язана з обмеженнями у ситуаціях прийняття рішень (обмеження за часом та елементами простору параметрів, що характеризують фактори прийняття рішень);
- невизначеність, викликана зверненням середовища чи ворога, що впливає процес прийняття рішення.

Часткове або повне зняття невизначеності може бути досягнуто за рахунок наявної або додатково одержуваної інформації.

На підставі застосування теорії дослідження операцій, системного аналізу та теорії прийняття рішень нами пропонується наступна методика формування складу та послідовності 11-ти етапів процесу прийняття рішень в умовах невизначеності:

1. Отримання інформації про проблемну ситуацію стану об'єкта управління.
2. Формулювання проблемної ситуації (поточний її аналіз, з'ясування особливостей проблеми, що виникла, ступінь терміновості та необхідності її вирішення).
3. Визначення цілей вирішення проблеми та вибір критеріїв ефективності.

4. Виявлення та формування обмежувальних умов.
5. Розробка альтернатив, визначення можливих варіантів вирішення та попередній їх аналіз з метою вибору найбільш ефективних.
6. Формулювання постановки задачі.
7. Розробка логіко-математичної моделі завдання, що дозволяє оцінювати ефективність кожної альтернативи.
8. Аналіз та вибір методів розв'язання задачі, розробка алгоритму.
9. Оцінка альтернатив та визначення з них найбільш ефективною.
10. Прийняття рішень ЛПР на основі наявного досвіду з урахуванням соціального, психологічного, технологічного та інших аспектів управління.
11. Реалізація та контроль прийнятих рішень.

Процес прийняття рішень за умов невизначеності є складною циклічною процедурою. Результат практично кожного з етапів може суттєво вплинути на постановку задачі та викликати її зміну. Формально процедура прийняття рішень у завданнях управління є деяким функціональним відображенням, яке формує рішення при початковому наборі даних у процесі пошуку.

Вважатимемо, що вихідна H і оцінювана G функції задані. Процедура вибору з безлічі можливих варіантів рішення полягає в використанні оцінюваної функції до вхідний. Визначимо вихідну функцію як відображення виду $H : L \times \Omega \rightarrow Y$, де L, Y і Ω - множини відповідно варіантів рішень, можливих результатів на виході та заходи невизначеності.

Тоді функцію, що оцінюється G визначимо як відображення виду $G : L \times Y \rightarrow E$, де E - безліч величин, зумовлених показниками.

Нехай X і X° - множини відповідно можливих і допустимих рішень, g - функція, що відображає $X \times \Omega$ в деяку кількість U , частково чи цілком упорядковано ставленням $\leq$, а τ - функція, що перекладає Ω в Y (функція допустимості), тобто $g : X \times \Omega \rightarrow U, \tau : \Omega \rightarrow Y$. Тоді задачу знаходження задовільних рішень сформулюємо в такий спосіб: для заданої множини $X^\circ \leq X$ визначити також $x \in X$, щоб для всіх $\omega \in \Omega$ виконувався критерій задоволення виду $g(x, \omega) \leq \tau(\omega)$.

З допомогою нерівностей цього виду робимо відбір всіх варіантів, які задовольняють вимоги, прийнятому цьому етапі критерію. Загалом завдання визначення обґрунтованих рішень визначимо як сукупність значень $(g, \tau, X^\circ, \Omega)$, а рішенням у цьому випадку є $x \in X$, для якого виконується зазначена нерівність при $\omega \in \Omega$. Функцію мети g задаємо вихідної та оцінюваної функціями відповідно до виду:

$$\begin{aligned} H &: X \times \Omega \rightarrow Y \\ G &: X \times \Omega \times Y \rightarrow Y, \end{aligned}$$

де Ω - безліч можливих факторів, які впливають на результат рішень X .

Тоді $g(x, \omega) = G\{x, \omega, H\}$.

Рішення X - вважатимемо задовільним, якщо воно призводить до значення оцінюваної функції, яка не перевищує певного рівня $\tau(\omega)$ за будь-яких

$\omega \in \Omega$. Крім усього, якщо $\Omega = \emptyset$, а це відповідає нагоді видимого зв'язку між L і Y у відсутності невизначеності) завдання можна привести до вигляду $g(x) = G\{xH/x\} \rightarrow \min$.

Однією з основних вимог до засобів прийняття рішень є адаптація принципів управління, що реалізуються за умов функціонування системи управління. У динамічному середовищі з частковою невизначеністю ефективність прийнятих рішень залежить від визначеності та достовірності знань про стан об'єктів управління за умов функціонування системи управління.

На підставі викладеного сформулюємо завдання процесу управління: на основі інформації, що отримується, з'ясувати стан керованих об'єктів та умов їх функціонування, визначити необхідні дії для управління.

Основним фактором, який визначає процес прийняття рішень, є ситуація S яка вимагає прийняття рішень щодо дії на керований об'єкт керуючої дії X та пошуку рішення $\varphi : X = \varphi(S)$.

Представимо модель автоматизованого пошуку рішень у вигляді кортежу:

$$\Sigma = \langle T, I, W, D_I, D_X, Z, V, P, X, Q, \Theta, \varphi \rangle,$$

де T - безліч моментів часу;

I - Інформація про стан об'єкта управління;

W - інформація про стан довкілля;

D_I - множина допустимих значень стану об'єкта управління;

D_X - безліч допустимих управляючих процесів;

Z - безлічі цілей управління;

V - Можливості обчислювальної техніки;

P - Відомості про систему пріоритетів;

X - множин управляючих процесів;

Q - безліч зв'язків між I і X ;

Θ - безліч закономірностей діяльності об'єкта;

φ - Відображення, що характеризує процес пошуку рішень.

Для реалізації відображення $\varphi : I \rightarrow X$ пропонується наступна послідовність логіко-математичних етапів процесу прийняття рішень:

1. Формулювання проблемної ситуації S :

$$\varphi_1 = \langle T, I, D_I, W, Z, S \rangle;$$

2. Класифікація ситуацій:

$$\varphi_2 = \langle S, K_1, K_2, P_1 \rangle,$$

де K_1, K_2 і P_1 - безліч відповідно класів ситуацій, правил класифікації та експертних переваг під час оцінки ситуації ($P_1 \in P$);

3. Вибір стратегії пошуку рішень (формування завдань)

$$\varphi_3 = \langle S, Q, \Theta, R, P_2, C \rangle,$$

де R - Ресурси для ліквідації проблемної ситуації; P_2, C - безлічі відповідно переваг під час вибору стратегій та стратегій пошуку керуючих рішень (корегування виробничих планів, заміна ресурсів).

4. Побудова моделі пошуку рішення

$$\varphi_4 = \langle S, K, C, P_3, M \rangle,$$

де P_3, M - множини відповідно переваг ЛПР під час моделювання та формування моделей.

5. Конструювання процедури пошуку рішень

$$\varphi_5 = \langle M, V, P_4, A \rangle,$$

де V, P_4, A - множини відповідно до можливостей засобів обчислювальної системи (моделі, алгоритми, модулі, засоби спілкування тощо), переваги ЛПР під час конструювання процедури пошуку рішень та алгоритмічних процедур пошуку рішень.

6. Формування варіанта вирішення

$$\varphi_6 = \langle M, A, X, F, P_5 \rangle,$$

де F - безліч критеріїв оцінки корисності рішення.

7. Вибір рішення

$$\varphi_7 = \langle M, F, P_6, X^* \rangle,$$

де P_6 - безліч переваг (неформального характеру) під час вибору рішення; X^* - найкраще рішення, прийняте ЛПР з урахуванням оцінок.

Перелічені етапи процесу пошуку рішень дають можливість сформулювати постановку задач адаптації, що складається у визначенні процедури пошуку A керуючих дій X відповідно до стану об'єкта I та впливу зовнішнього середовища W .

Процес пошуку альтернатив складається із трьох основних функціональних блоків:

Блок 1 – формування ситуацій S , призначений для виявлення та опису певною мовою ситуації S на основі аналізу інформації про стан об'єкта управління I та зовнішнього середовища W , досвіду ЛПР, функціонування цього блоку, що включає етапи φ_1 і φ_2 визначимо наступним відображенням

$$\psi_1 : I \times W \times P \rightarrow S.$$

Блок 2 – конструювання моделі M - призначений для створення логіко-математичних моделей пошуку альтернатив для вирішення відповідної поточної проблемної ситуації; функціонування цього блоку, що містить етапи φ_3 φ_4 , визначимо наступним відображенням:

$$\psi_2 : S \times C \times P \rightarrow M.$$

Блок 3 – визначення процедур пошуку A - призначений для формування та вибору альтернативних дій на основі моделі M , процедури пошуку альтернатив рішення A та системи переваг ЛПР. Функціонування цього блоку, що містить етапи φ_5, φ_6 і φ_7 визначимо наступним відображенням:

$$\psi_3 : M \times A \times P \rightarrow X.$$

Загалом адаптивна модель пошуку альтернатив рішення має вигляд:

$$\begin{array}{c} I \rightarrow S \rightarrow M \rightarrow X, \\ \uparrow Y_1 \uparrow Y_2 \uparrow Y_3. \end{array}$$

де Y_1, Y_2, Y_3 - функції відповідно до опису ситуації деякою мовою, перекладу його у формалізовану модель та визначення процедури формування рішення.

Наведені етапи функціонування мають здатність адаптуватися до ситуації за рахунок конструювання та коригування елементів процесу пошуку альтернатив рішень (моделей, стратегій, алгоритмів).

Процес формалізації завдань прийняття рішень у конкретній предметній області може бути представлений у вигляді моделі, вираженої сукупністю множин

$$M = \langle X, A, Y, F \rangle,$$

де X, A, Y - безлічі відповідно керуючих, фіксованих та керованих параметрів середовища; F - безліч функціональних залежностей, які пов'язують елементи множин X, A, Y . Для кращої реалізації діалогу, у багатьох X, A, Y введемо короткі словесні характеристики відповідних параметрів. У цьому випадку безлічі X і Y будуть представлені як набори впорядкованої пари виду:

$$X = \{(h_i, x_i), i \in I = \overline{1, n}\}; Y = \{(h_j, y_j), j \in J = \overline{1, m}\},$$

а множини A - як набір упорядкованих трійок виду

$$C = \{(h_\ell, a_\ell, a_\ell^R), \ell \in L = \overline{1, L}\},$$

де h_i, h_j, h_ℓ - Назву відповідних параметрів; x_i, y_j, a_ℓ - їх умовні позначення; a_ℓ^R - Відомі кількісні значення фіксованих параметрів.

Модель цього виду відображає основні закономірності конкретного середовища та залежності виду $Y_j = f(x_1, x_2, \dots, x_n, a_1, \dots, a_n)$, які їх пов'язують. З іншого боку, модель дозволяє формувати в діалоговому режимі різні постановки завдань прийняття рішень певного класу.

Порівняльна оцінка якості СППР, розроблених із застосуванням СПРУП та з використанням традиційних підходів показала, що застосування СПРУП дозволяє покращити якість та ефективність СППР в управлінні СПП, тому може бути рекомендована як допоміжний компонент, який складається із засобів моделювання прийняття рішень, та контролює процес функціонування СППР.

Контрольні питання та завдання

1. Перерахуйте основні етапи процесу побудови математичної моделі.
2. Дайте визначення концептуальної та математичної постановки задачі.
3. З якою метою застосовується перевірка адекватності моделі?
4. Опишіть два принципи побудови моделі.
5. Які підходи до побудови математичної моделі ви знаєте? У чому вони?
6. Сформулюйте складові похибки під час використання чисельних методів.
7. Дайте визначення коректності математичної моделі.
8. Перерахуйте основні етапи циклу обчислювального експерименту.
9. Що становить основу обчислювального експерименту?
10. У чому відмінність та подібність лабораторного та обчислювального експерименту?
11. Яким вимогам має відповідати обчислювальний алгоритм?
12. Назвіть етапи створення програми для розрахунків.
13. Перерахуйте переваги обчислювального експерименту.
14. У яких сферах застосовується обчислювальний експеримент?
15. Що таке імітаційне моделювання?
16. Які види імітаційного моделювання?
17. У яких сферах застосовується імітаційне моделювання?
18. У чому полягає метод статистичного моделювання?
19. Розкажіть суть методу Монте-Карло.
20. У чому переваги та недоліки методу Монте-Карло?
21. Що таке псевдовипадкові числа?
22. Наведіть кілька прикладів математичних моделей для опису фізичних процесів.
23. Які математичні методи застосовують у хімії?
24. Назвіть найпростіші математичні моделі у біології.
25. Які моделі еволюції ви знаєте?

4. БАГАТОМАСШТАБНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ І ПРОЦЕСІВ

Протягом останніх десятиліть у матеріалознавстві та інших галузях техніки домінували методи континуальної механіки (безперервна чи хвильова: гідродинаміка, акустика, теорія пружності та інші галузі фізики).

Відповідно до цього підходу середовище вважається безперервним, безструктурним, а кожен елемент його обсягу взаємодіє з усіма сусідніми елементами за законами класичної механіки. Однак численні експериментальні спостереження за поведінкою матеріалів, особливо в наномасштабі, свідчать про ряд явищ, які не пояснюються в рамках континуальної механіки.

Серед них можна виділити наявність поверхневої шорсткості, неоднорідність пластичної деформації та ін. У зв'язку з чим виникає необхідність знайти фундаментальний опис механічних властивостей матеріалів, виходячи з властивостей та будови атомів, молекулярних систем та нанокластерів.

Необхідність багатомасштабного моделювання обумовлена суттєвою різницею між обсягом необхідних розрахунків та обмеженістю обчислювальних ресурсів.

У процесі впровадження багатомасштабного підходу у проектуванні наносистем можна відзначити два напрямки:

- **Застосування різних методик моделювання до різних елементів системи, наприклад, квантових методів - до реакцій, а молекулярної механіки - до структур, що несуть реакційні центри або обмежують їх положення.** Такий підхід був реалізований для моделювання співвідношень структура – властивість – функція в ензимах. Важливим завданням є поширення цього принципу на змішані моделі інших видів.

- **Доопрацювання конструкцій.** Для цього спочатку за допомогою недорогих та порівняно неточних методик виявляються перспективні системи, які потім досліджують більш точними та витратними методами. Такий підхід підвищує швидкість оцінки конструкції з урахуванням апріорі відомих обмежень використовуваних моделей, що підвищує продуктивність проектування. Необхідно забезпечити поступовість інтеграції цієї методології до технології атомарної точності.

Використання комп'ютерного моделювання для наносистем має важливі проблеми:

- відсутній далекий порядок, властивий кристалам і що дозволяє зменшити кількість незалежних ступенів свободи системи;
- ближній порядок, характерний для рідин, що не дозволяє визначити всі функціональні властивості наноматеріалів;
- технічні проблеми, пов'язані з моделюванням на атомному рівні макрооб'єктів.

Пряме моделювання таких систем у наближенні молекулярної динаміки

і, тим більше квантової механіки, важко навіть з використанням сучасної суперкомп'ютерної техніки. Рішенням може бути використання у моделюванні ієрархічного багатомасштабного підходу, коли на кожному нижньому рівні обчислюються параметри та змінні, необхідні для побудови моделей верхнього рівня.

4.1. Види багатомасштабного моделювання

Центральна проблема багатомасштабного моделювання полягає у забезпеченні самоузгодженості розрахунків, що враховують внутрішні ступеня свободи компонентів та збереження молекулярної інформації на всіх просторових шкалах та у всьому діапазоні часу для всіх стадій фізико-хімічного процесу, що протікають у різних агрегатних станах.

Це особливо важливо для нанооб'єктів, тому що для них суттєвий великий внесок меж розділу фаз і необхідно описувати різні фази з однаковою точністю [25].

Концепція багатомасштабного моделювання зазвичай інтерпретується як моделювання системи з різних масштабів (розмірів). Є кілька підходів до реалізації та подання досліджуваної системи, зазвичай вони не пов'язані, тобто кожен з можливих підходів здійснюється окремо та незалежно від інших.

Залежно від способу інформаційного обміну між рівнями моделювання, методи багатомасштабного моделювання можна умовно розділити на три групи:

- **Ієрархічні.** Є ефективним для пластичних однофазних систем.
 - Метод кінцевих елементів атомних масштабів.
 - Гібридна багатомасштабна обчислювальна процедура.
 - Повноатомні моделі.
- **"Сполучені".** Важливі вивчення неоднорідної деформації, поведінки багатофазних матеріалів і нано рідин.
 - Метод кінцевих елементів.
 - Метод молекулярної динаміки.
 - Метод сильного зв'язку.
 - Квазиконтинуальний метод.
- **З багатомасштабними граничними умовами.**

В рамках ієрархічних методів атомні властивості тіла формулюються в континуальному масштабі таким чином, щоб дрібні шкали залежали від великих шкал деяким передбачуваним чином.

Ієрархічний підхід ґрунтується на припущенні про гомогенний характер деформації. Складність виникає при моделюванні дефектів атомних решіток та ін. Наприклад, метод кінцевих елементів для атомних масштабів (АМКЕ), що використовується для багатомасштабного моделювання, має таку саму формальну структуру, як і континуальний метод кінцевих елементів, і, таким чином, може бути плавно поєднаний із атомарним рівнем.

АМКЕ використовує обидві, першу та другу, похідні енергії системи у

обчисленнях її мінімуму. Метод кінцевих елементів спрямовано розрахунки систем, мають складну геометричну конфігурацію і нерегулярну фізичну структуру.

У методі КЕ завдання пошуку функції замінюється завдання пошуку кінцевого числа її наближених значень в окремих точках-вузлах [25].

Метод кінцевих елементів застосовується для моделювання намагнічування надпровідників (зміни параметра рядка і розподілу надструму в надпровідниках різної конфігурації) [25], напружено-деформованого стану в гетероструктурі з «квантової точкою» без покривного шару [22], а також для ефективних параметрів композитних середовищ (ефективний показник поглинання, відбивна та пропускна здатність композитного моношару) [22].

Розроблено спосіб моделювання з використанням гібридної багатомасштабної обчислювальної процедури, ідея якої полягає у збереженні повного молекулярного опису системи в тих областях, де це становить найбільший інтерес, та використання моделі «грубих зерен» в інших областях системи. Це стало можливим завдяки поєднанню молекулярної динаміки з мезоскопічним описом реальних рідин, що ґрунтуються на флуктуаційній гідродинаміці Ландау.

У разі «сумісних» методів багатомасштабного моделювання поведінка системи в кожній розмірній шкалі залежить від її поведінки в інших шкалах. Відповідні моделі для кожної розмірної шкали вже розроблені: континуальна механіка для макропружних середовищ, молекулярна динаміка з квантовомеханічним зв'язком для великих груп молекул.

Між різними шкалами існує дуже складний взаємозв'язок, який потребує чіткого визначення та згладженості. З використанням «поєднаних» методів виникає, звісно, ряд методологічних питань: як поділити шкали, що адекватним механізмом зв'язку атомного і континуального моделювання, як інтегрувати результати різних шкал моделювання та інших.

Для їх вирішення пропонується, зокрема, запровадити так звану область з'єднання, де поєднуються методи моделювання у різних масштабах: кінцевих елементів, молекулярної динаміки та сильного зв'язку. У групу «поєднаних» методів входить так само квазіконтинуальний метод, в якому поєднуються методи молекулярної динаміки та кінцевих елементів. Зв'язок між ними здійснюється через комірку «адаптації», що дозволяє здійснювати переміщення від квазіконтинуального масштабу до атомного рівня.

Крім вищеназваних є метод молекулярної динаміки, що поєднує квантовомеханічний опис об'єктів та використання моделі класичних сил. Різні типи опису досліджуваної системи поєднуються в єдину об'єднану схему, яка заснована на ідеї посилення (уточнення) унікальних моделей сил, що параметризуються шляхом включення в такі моделі (під час виконання програми) квантовомеханічної інформації, необхідної для більш точного визначення траєкторій руху.

Прикладом застосування методу сильного зв'язку для нанотехнологій є моделювання структури та стійкості полімерів на основі фулеренів [21]. В роботі досліджено різні можливі ізомери кластерних молекул, що складаються

з двох фулеренів C₂₀, і були виявлені десять різних ізомерів, два з яких найбільш стійких ізомери представлені на рис. 16. У роботі також отримані стійкі двох та тривимірні структури на основі фулеренів.

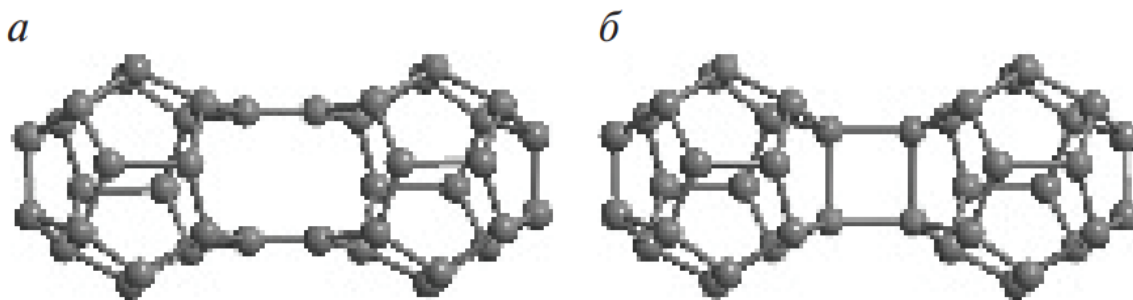


Рис. 16. Ізомери кластерних молекул, що складаються з двох фулеренів C₂₀:
а- open_[2 + 2]; б - [2 + 2]

Суть цього методу полягає в обліку спрямованих ковалентних зв'язків у рамках емпіричного гамільтоніану сильного зв'язку. Такий спосіб дозволяє врахувати квантовомеханічну природу ковалентного зв'язку.

При цьому метод виявляється застосовним до великого розмаїття кристалічних вуглецевих полімерів. Цей метод вигідно відрізняється від більшості класичних підходів тим, що дозволяє точніше визначити вклад електронної підсистеми в повну енергію.

При цьому враховуються чотири валентні електрони кожного атома вуглецю, а міжатомний потенціал фактично є Nчастковим, де N — число атомів у системі. Хоча метод сильного зв'язку і не є таким суворим, як першопринципні методи, він, з одного боку, досить добре описує як малі вуглецеві кластери, так і макроскопічні форми вуглецю, а з іншого - сильно спрощує розрахунки навіть для порівняно великих кластерів, дозволяючи, зокрема, дослідити динаміку кластерів та набрати статистику, достатню для визначення енергії активації розпаду та часу життя метастабільного стану.

Методи багатомасштабних граничних умов не включають у явному вигляді модель континуального середовища, щоб не виникало проблем із поділом шкал. Багатомасштабні граничні умови використовуються в основному в «суміщених» методах моделювання, щоб уявити атомну поведінку системи в континуальному середовищі. Це призводить до плавного зв'язку між методами кінцевих елементів та молекулярної динаміки без залучення штучної області «зшивання» атомної системи з континуальним середовищем.

Існують також звані гібридні методи, метою яких є з'єднання областей з незрівнянними масштабами часу і довжини.

4.2. Багатомасштабне моделювання енергетичних процесів

Через відсутність теоретичних уявлень про природу і механізм ядерних сил існує кілька різних моделей атомного ядра, проте жодна з них не може пояснити все різноманіття експериментальних даних. Тому кожна модель

через свою обмеженість використовується для з'ясування лише окремих ядерних процесів. Вирізняють дві найпоширеніші моделі ядра: краплинну модель і модель ядерних оболонок (оболонкову модель).

Крапельна модель атомного ядра заснована на збігу деяких властивостей ядра та краплі рідини:

- Між молекулами краплі проявляються короткодійні молекулярні сили.
- Кожна молекула взаємодіє лише з прилеглими молекулами.
- Рух молекул хаотичний, вони часто стикаються і обмінюються своєю енергією.
- Поверхневі молекули в краплі однобічно пов'язані з внутрішніми, в результаті цього виникають поверхневі сили натягу і крапля набуває круглої форми, тобто має мінімальну поверхню при даному обсязі.
- Щільність краплі рідини залежить від її розміру.

Таким чином, відповідно до крапельної моделі ядро представляють у вигляді краплі ядерної рідини, в якій нуклони рухаються інтенсивно і безладно, відчуваючи багато чисельних зіткнень. Кожне таке зіткнення супроводжується сильною взаємодією нуклонів, між ними відбувається обмін енергією та імпульсом. Розміри та стійкість ядерної краплі зберігаються за допомогою поверхневих сил ядерного тяжіння.

Крапельна модель ядра дозволяє передбачити ряд важливих та цікавих результатів, що підтверджуються експериментальними даними.

- Об'єм ядерної краплі заповнений нуклонами як крапля рідини молекулами. Тому обсяг ядра пропорційний кількості у ньому нуклонів.
- Маса ядерної краплі також пропорційна числу нуклонів, тому всі ядра мають однакову об'ємну густину нуклонів і однакову густину ядерної речовини.
- Середня відстань між центрами двох розташованих нуклонів також є постійною величиною і не залежить від числа нуклонів в ядрі.
- Крапельна модель ядра дозволяє отримати напівемпіричну формулу для розрахунку енергії зв'язку атомного ядра.

У той же час є багато ядерних явищ, які крапельна модель ядра пояснити не може, наприклад, вплив протон-нейтронної структури на стійкість ядер.

Застосування квантової механіки до руху нуклонів у потенційній ямі дає теоретичне обґрунтування оболонкової моделі ядра. Така модель послужила основою розробки оболонкової моделі нанокластера.

В оболонковій моделі приймають, що нуклони в ядрі рухаються оболонками в полі дії інших нуклонів аналогічно руху електронів в атомних оболонках. При збудженні ядра один чи кілька нуклонів переходять на збуджені рівні. Наступні їх переходи в основний стан супроводжуються випромінюванням γ -квантів.

Оболонкова модель ядра у фізичному відношенні є більш загальною та універсальною порівняно з крапельною, до того ж дозволяє пояснити ряд внутрішніх властивостей ядра. У той самий час не можна спрощено розуміти

фізичну сутність оболочечної моделі. Нуклонні оболонки не залишаються незмінними - вони постійно перебувають під впливом нуклонів, які не потрапили в заповнену оболонку. Виникає дуже складна внутрішньоядерна картина, окремі особливості якої можуть бути описані або краплинною, або оболонковою моделями ядра. Тому обидві моделі, що взаємно доповнюють одна одну, використовують у теоретичному аналізі ядерних явищ.

4.3. Моделювання в наноструктурній галузі

Основною проблемою моделювання є те, що вчені мало знають про фундаментальні закономірності поведінки окремих частинок, структур та цілих систем у просторовому нанометровому масштабі. Наночастинки одночасно і надто малі (для безпосереднього спостереження та вивчення), і надто великі (для квантово-механічних розрахунків, які в нанообласті виявляються дуже наближеними). Дослідники поки що не вміють досить точно моделювати поведінку наночастинок, оскільки їх характеристики безперервно змінюються в часі та просторі, а кількість частинок, що об'єднуються в наносистеми, ще недостатньо велика, щоб розглядати ці системи як статистичні ансамблі.

У методах розрахунку та аналізу характеристик наносистем однією з найголовніших є проблема масштабування, яка, як показано на рис. 17 повинна розглядатися в трьох різних аспектах або вимірюваннях [5].

1. Вісь «Розмір» представляє діапазон змін масштабу в досліджуваній області, а саме від розмірів атома (~ 1 анг стрем) до максимальних розмірів наночастинок (~ 1 мкм).

При цьому якщо розмір об'єктів, що вивчаються, змінюється від 1 до 100 нм, то кількість частинок, що містяться в них, змінюється від 10^2 до 10^{11} . Через малі розміри частинок сильно підвищується роль поверхневих ефектів і взаємодій з іншими частинками або навколишнім середовищем, що вимагає використання у відповідних розрахунках хімічних потенціалів

2. Вісь «Час» відповідає динамічній (тимчасовій) зміні масштабу подій. Хоча зміна масштабу цієї осі є лінійним, проте сам діапазон зміни дуже широкий, оскільки час процесів, що вивчаються, змінюється на 15 порядків, від 1 фс (10^{-15} с) до 1 с. Наявність різноманітних часових масштабів викликає необхідність урахування як тимчасових флуктуацій частинок, так і неоднорідності їх розподілу за розмірами.

3. По осі «Точність» показані відповідні зміни точності розрахунків та вимірювань. Її підвищення є необхідною умовою як розробки принципів конструювання матеріалів і розуміння сутності які у них явищ, так скорочення кількості складних і дорогих експериментів. Надійність моделювання пов'язана також із різницею відносної точності параметрів у різних часових та просторових масштабах, що є дуже серйозною проблемою.

У табл. 2 наведено перелік основних кінетичних методів та часовий діапазон використовуваних для розрахунку динаміки процесів.

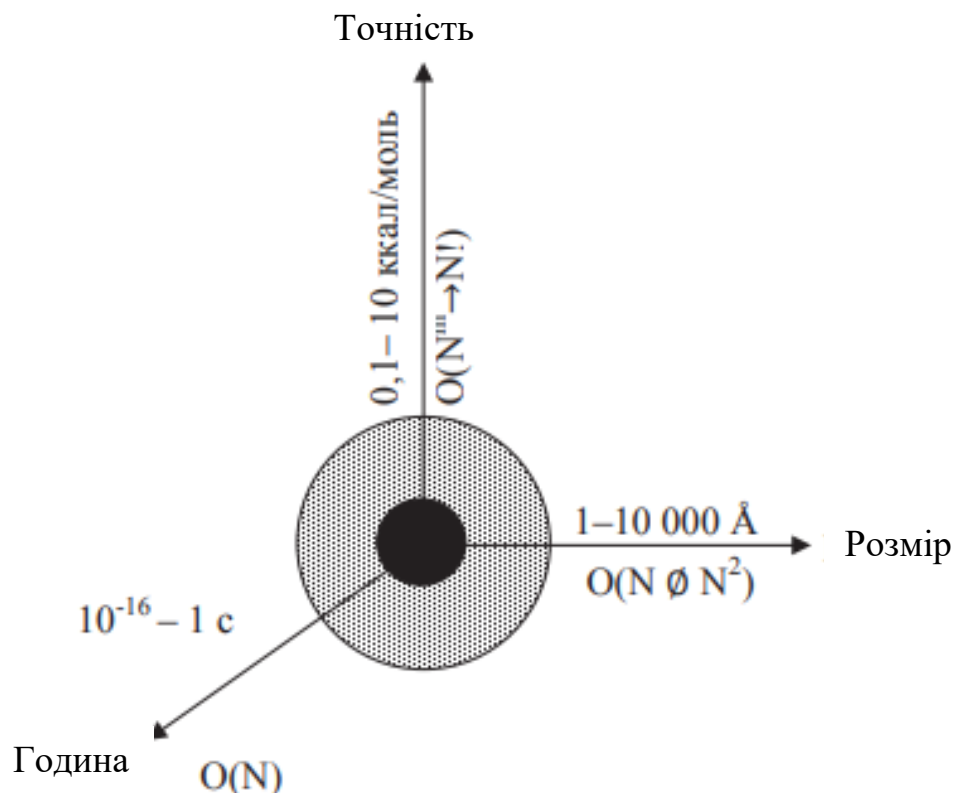


Рис. 17. Різні виміри масштабування

Велика інформація про властивості наносистеми може бути отримана в результаті її повної енергії. Зокрема, стабільні конфігурації та структура, стан рівноваги наносистем обумовлені мінімальним значенням енергії. Похідні повної енергії щодо координат ядер дозволяють знайти частоту коливань системи.

Таблиця 2. Характерні часи використання методів моделювання кінетичних фізико-хімічних процесів

№ П/П	МЕТОД	ДІАПАЗОН ЧАСУ, з
1	Молекулярна динаміка (МД)	$10^{-13} \div 10^{-7}$
2	Кінетичний Монте-Карло (КМК)	$10^{-12} \div 1$
3	Броунівська динаміка	$10^{-7} \div 10^{-5}$
4	Рівняння Больцмана (для газів, континуальне)	$10^{-8} \div 10^{-4}$
5	Рівняння Больцмана (дискретне)	$10^{-9} \div 1$
6	Модель ґратового газу (МРГ)	$10^{-12} \div 1$
7	Мікроскопічна гідродинаміка	$10^{-13} \div 10^{-5}$
8	Ґратові автомати	$10^{-5} \div 1$
9	Гідродинамічні рівняння	$10^{-5} \div 1$

З точки зору наномеханіки матеріалів квантовомеханічні розрахунки енергії наносистеми мають також велике значення, тому що дозволяють визначити різні механічні властивості – структуру дефектів, наявність домішок, межі зерен тощо. Крім цього, електронні, оптичні та магнітні властивості матеріалів також визначаються рівноважною атомною конфігурацією структури.

Вибір того чи іншого методу моделювання наноструктур часто ґрунтується на компромісному рішенні між надійністю, точністю та часом розрахунків. Залежно кількості досліджуваних атомів у системі використовують такі методи моделювання (рис. 18)

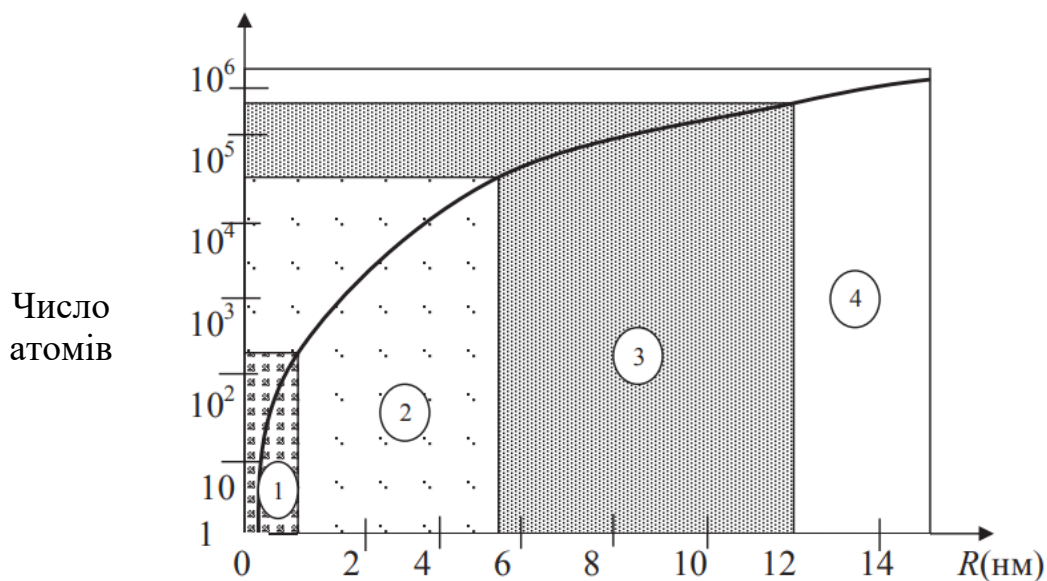


Рис. 18. Число атомів N у сферичному нанокристалі кремнію в залежності від його радіусу:

- 1 - розрахунки «з перших принципів», 2 - напівемпіричні методи,
- 3 - метод сильного зв'язку, 4 - методи молекулярної динаміки

1. Поведінка кількох десятків і сотень атомів досить точно моделюється з використанням методів квантової механіки, заснованих на методах Хартрі-Фока та теорії функціоналу щільності розрахунків «з перших принципів», у яких моделювання пов'язане з рішенням рівняння Шредінгера для атомних систем (що включають ядра та електрони) та використанням числових алгоритмів. Дані методи забезпечують точніший опис поведінки матеріалів на квантовому рівні, навіть якщо розміри систем обмежені кількома сотнями атомів. Однак їх проведення потребує значних обчислювальних ресурсів. Тому велике значення серед різних методів квантово-механічного моделювання при обмежених обчислювальних ресурсах набувають напівемпіричних підходів. Сучасні методи моделювання конденсованих середовищ, кластерів, нанотрубок та ін.

2. Для систем, що містять від кількох сотень до кількох тисяч атомів, використовують напівемпіричні методи, що базуються на квантовій механіці. Ефективність обчислення з використанням напівемпіричних методів полягає

в тому, що оператор Гамільтона квантової системи може бути записаний у параметричній формі. Розроблено, зокрема, узагальнений квантовокласичний метод Кара-Парріселло, в якому класичне трактування руху ядер, розрахованого методами молекулярної динаміки, поєднується з квантовим описом руху електронів. При цьому потенційна енергія системи, необхідна для знаходження сил, які діють атоми, вибирається не параметрично, а процесі комп'ютерного моделювання. Цим методом побудовано моделі рідких металів та оксидів порівняно невеликих розмірів (до ста атомів). Більш широке застосування отримав метод псевдопотенціалів, коли розглядається поведінка лише валентних електронів і шляхом процедурних перетворень знижується ступінь осциляції хвильових функцій їх поблизу ядра атома. На емпіричному рівні значення псевдо потенціалів можна розрахувати як функції взаємодії атомів з невеликим числом параметрів. Це дозволяє краще описати наноструктуру напівпровідників.

3. Системи з кількома десятками тисяч атомів найбільш ефективно моделюються за допомогою одного з представницьких методів, що використовуються в матеріалознавстві, - методу сильного зв'язку (МСС). Основою цього є застосування лінійної комбінації атомних орбіталей. МСС успішно розвивається для дослідження неорганічних матеріалів, включаючи аналіз взаємодії між структурними та електронними властивостями напівпровідників за наявності дефектів поверхні. Зазвичай під час використання МСС який завжди забезпечується достатня точність результатів, оскільки кожного конкретного випадку потрібен свій вибір емпіричних параметрів.

4. Складні системи з великою кількістю атомів, що потребують величезних обчислювальних потужностей, досліджуються методами молекулярної динаміки і Монте-Карло. Основною їх проблемою є проблема вибору потенціалу міжатомної взаємодії. Від цього багато в чому залежать результати моделювання. Спочатку використовувалися найпростіші потенціали парної взаємодії, а потім багаточасткові потенціали. Як видно із рис. 19 при розмірах наносистем більше 12 нм і числа атомів більше 105 вирішальна роль при моделюванні наносистем належить методам молекулярної динаміки. Однак для такого моделювання необхідно знайти сполучну ланку між двома ієрархічними рівнями: атомною структурою та молекулярною динамікою. Методи молекулярного моделювання найбільш чітко поділяються за ознакою наявності чи відсутності інформації про електронні властивості системи. Така класифікація відокремлює класичні моделі від квантово-механічних. Теорії вищого рівня зазвичай дозволяють розробити методи для розрахунків властивостей, доступних теоріям нижчого ієрархічного рівня. Якщо розглянути вдосконалені методи Хартрі-Фока, які можуть передбачити електронні переходи та геометрію збудженого стану, їх можна використовувати і для високоточних розрахунків геометрії основного стану молекул. Квантово-хімічні методи як можуть дати методіку розрахунку геометрії динаміки системи, що є також методам молекулярної механіки, а й забезпечують обґрунтування багатьох цих методів. Вони оцінюють параметри

взаємодій з розрахунків за моделями «з перших принципів» і за теорією функціоналу щільності. Що стосується наномірних систем визначальною характеристикою моделювання, яке ґрунтується на поданні системи сукупністю молекул, є обмеженість області, в якій проводяться обчислення. Методи такого молекулярного моделювання оперують головним чином самою "системою", нехтуючи "оточенням", хоча в деяких варіантах молекулярної теорії вивчається поведінка молекул або ансамблів у середовищах. У разі окремих молекул або дискретних кластерів молекул молекулярні методи, що взаємодіють, дають велику кількість інформації, включаючи відносні енергії зв'язування міжмолекулярних взаємодій. Якщо взаємодія системи з оточенням порівняно слабка, то розрахунки з цих методів можуть добре узгоджуватися з експериментом. У молекулярній динаміці взаємодіючі частки розглядають або як матеріальні точки, які виявляють свої потенційні сили тільки при зближеннях між собою, або як жорсткі сфери без внутрішньої структури. Таким чином, передбачається, що внутрішня будова атомів та молекул не змінюється у процесі динамічного моделювання. Проте кожен із атомів у межах системи МД представляє складний фізичний об'єкт, який, розвиваючись у часі, може змінювати свою внутрішню будову, обмінюючись енергією з довкіллям. Більше того, потенціали усереднених міжатомних сил, які використовують у молекулярній динаміці, визначаються фактично характеристиками атомних станів та процесів. Слід зазначити, що розміри та часові рамки методів моделювання МД обмежені. Типова сфера застосування МД - системи, що складаються з декількох мільйонів атомів, у той час як наноустрою можуть містити мільярди атомів. Тому інтенсивно розробляються методи,

5. До таких моделей можна віднести так званий віртуальний атомний кластер (ВАК). Наявність слова «віртуальний» означає, що ця модель не відповідає фізичному розташуванню атомів. ВАК є мінімальним набором атомів, який формує кластер, що має певну щільність енергії. Головна особливість моделі ВАК полягає в тому, що атомний опис системи безпосередньо входить до методу моделювання кінцевих елементів (КЕ), при цьому взагалі не використовуються такі поняття, як напруга або навантаження. Такий підхід забезпечує пряме проходження інформації між квантово-механічними характеристиками системи та методом кінцевих елементів, тобто дає можливість опису системи у різних розмірних шкалах шляхом введення нової змінної величини – так званого параметра зміщення. Модель ВАК дає можливість безпосереднього розгляду енергії зміщення або карти деформації замість напруги. Для багатьох атомних систем є можливість моделювання динамічного розвитку як функції часу. Розроблено деякі точні квантові молекулярні динамічні схеми, у яких міжатомні сили обчислюються кожному тимчасовому відрізку з допомогою квантово-механічних обчислень у межах наближення Борна–Оппенгеймера. Динамічне рух іонних позицій досі підпорядковується законам ньютонівської механіки і описується молекулярною динамікою. Найбільш широко відомою та точною схемою є молекулярний динамічний метод Кара-Парріселло, в якому електронні стани та атомні сили

описуються за допомогою теорії функціоналу щільності. Для багатьох атомних систем є можливість моделювання динамічного розвитку як функції часу. Розроблено деякі точні квантові молекулярні динамічні схеми, у яких міжатомні сили обчислюються кожному тимчасовому відріzkу з допомогою квантово-механических обчислень у межах наближення Борна–Оппенгеймера. Динамічне рух іонних позицій досі підпорядковується законам ньютонівської механіки і описується молекулярної динамікою. Найбільш широко відомою та точною схемою є молекулярний динамічний метод Кара-Паррінілло, в якому електронні стани та атомні сили описуються за допомогою теорії функціоналу щільності. Для багатьох атомних систем є можливість моделювання динамічного розвитку як функції часу. Розроблено деякі точні квантові молекулярні динамічні схеми, у яких міжатомні сили обчислюються кожному тимчасовому відріzkу з допомогою квантово-механических обчислень у межах наближення Борна–Оппенгеймера. Динамічне рух іонних позицій досі підпорядковується законам ньютонівської механіки і описується молекулярної динамікою. Найбільш широко відомою та точною схемою є молекулярний динамічний метод Кара-Паррінілло, в якому електронні стани та атомні сили описуються за допомогою теорії функціоналу щільності. у яких міжатомні сили обчислюються кожному тимчасовому відріzkу з допомогою квантово-механических обчислень у межах наближення Борна–Оппенгеймера. Динамічне рух іонних позицій досі підпорядковується законам ньютонівської механіки і описується молекулярної динамікою. Найбільш широко відомою та точною схемою є молекулярний динамічний метод Кара-Паррінілло, в якому електронні стани та атомні сили описуються за допомогою теорії функціоналу щільності. у яких міжатомні сили обчислюються кожному тимчасовому відріzkу з допомогою квантово-механических обчислень у межах наближення Борна–Оппенгеймера. Динамічне рух іонних позицій досі підпорядковується законам ньютонівської механіки і описується молекулярної динамікою. Найбільш широко відомою та точною схемою є молекулярний динамічний метод Кара-Паррінілло, в якому електронні стани та атомні сили описуються за допомогою теорії функціоналу щільності.

На закінчення слід зазначити, що розрахункові методи наносистем перебувають у процесі інтенсивного розвитку, проте вже зараз дозволили передбачити ряд цікавих результатів:

- За допомогою напівемпіричних квантових моделей встановлено, що одні нехіральні нанотрубки вуглецеві (n, n) мають металевий тип зонної структури, а інші нехіральні нанотрубки (n, m) , $m \neq 0$, є металами; в інших випадках - напівпровідниками.
- За допомогою моделей молекулярної динаміки проведено розрахунок руху в ряді наноустроїв, зроблено оцінку міцності та стійкості наноконструкцій.

Останнім часом у літературі постійно з'являються результати великої кількості досліджень, пов'язаних із створенням різних наносистем та

наноустроїв із застосуванням засобів комп'ютерного моделювання.

4.4. Програмне забезпечення моделювання наносистем

Програмні засоби створюються для моделювання матеріалів та процесів у таких напрямках:

- Моделювання та дослідження властивостей супрамолекул.
- Моделювання мікроструктури за допомогою щільного пакування сфер.
- Моделювання мікроструктури за допомогою щільного пакування сферополієдрів.
- Моделювання пористої структури наномембран.
- Моделювання процесів спікання.
- Моделювання самоорганізації наночастинок.
- Імітаційне моделювання дифузійних процесів у мембранах.
- Імітаційне моделювання оптичного відгуку на сорбцію в ансамблі наночастинок.
- Моделювання дифузійних та адсорбційних процесів.
- Моделювання оптичного відгуку поблизу сенсорного шару.

У табл. 3 представлені комерційні та некомерційні продукти для моделювання наносистем.

Таблиця 3. Програмні продукти для моделювання наносистем

№ п/п	Назва ПЗ	Реалізовані методи	Застосування
Розрахунки «з перших принципів»			
1	ABINIT	Теорія функціоналу щільності, псевдопотенціали, базиси плоских хвиль	Розрахунок електронного спектру, просторової структури та макроскопічних властивостей різних систем, у тому числі великих органічних молекул та наночастинок
2	ADF	Теорія функціоналу щільності	Розрахунок молекул у газовій фазі, розчинених молекул, періодичних структур, головним чином кристалів, полімерів та поверхневих шарів, теплогідравлічні розрахунки для рідин

3	CFOUR	Теорія обурення Меллера-Плес і метод пов'язаних кластерів	Квантово-хімічні розрахунки: точний розрахунок енергій та властивостей атомів та молекул з урахуванням
4	CRYSTAL	Обмежений та необмежений метод Хартрі-Фока, теорія функціоналу щільності та гібридні методи	Моделювання молекул, кристалів та наноструктур
5	Dalton	Хвильові функції SCF, MP2, MCSCF	Розрахунок магнітних і залежних від частоти електричних властивостей та поверхонь потенційної енергії молекулярних систем як у статичних, так і в динамічних дослідженнях
6	GAMESS	Метод самоузгодженого поля. Теорія збурень, конфігураційна взаємодія, пов'язані кластери та функціонал щільності	Розрахунок молекулярних функцій хвиль з урахуванням енергії електронної кореляції. Пошук перехідних станів із використанням аналітичних градієнтів; обчислення молекулярних властивостей, електростатичного потенціалу, електронної та спинові щільності.
7	Gaussian	Методи теорії збурень, пов'язаних кластерів, конфігураційної взаємодії, функціоналу щільності, методу самоузгодженого поля	Дозволяє передбачати енергії, молекулярні структури та коливальні частоти молекулярних систем, поряд з багатьма іншими властивостями молекул. Можливий розрахунок енергії та оптимізація з аналітичними градієнтами. Є можливість моделювання надвеликих молекулярних систем, зокрема протеїнів завдяки методиці розбиття молекул.
8	Q-Chem	Удосконалені методи Хартрі-Фока: конфігураційних взаємодій, пов'язані кластери, теорія збурень Меллера-Плесе	Дозволяє вирішувати широке коло завдань: молекулярні структури, хімічні реакції, колювання молекул, ЯМР-спектри,

9	VASP	Псевдопотенціали, методи розрахунку електронної зонної структури PAW та базису плоских хвиль.	Квантово-механічні розрахунки «з перших принципів» у галузі молекулярної динаміки
10	WIEN2k	Теорія функціоналу густини. Метод лінеаризованих приєднаних плоских хвиль повного потенціалу та локальних орбіталей	Розрахунок електронних структур у твердих тілах
Напівемпіричні методи			
11	AMPAC	SAM1, AM1, MND0, MND-O/d, PM3, MND-O/C та MIND0/3, PM6 та RM1. Метод сольватації AMSOL	Розрахунок електронної структури молекул
12	MOPAC	RM1, PM6, MNDO, AM1 та PM3. Метод локалізованих молекулярних орбіталей	Розрахунок електронної структури основного та збуджених станів атомів, молекул та твердих тіл. Дослідження електронної структури макромолекул (білків, ДНК, полімерів та твердих тіл) та розрахунок великих біомолекул
13	CHARMM	Квантові моделі та силові поля в молекулярній механіці	Молекулярне моделювання різних систем від невеликих молекул до сольватованих комплексів біологічних макромолекул.
14	COSMOS	Гібридні силові поля та різні методи молекулярної динаміки	Комп'ютерне моделювання молекулярних структур, зокрема кристалічних. Пакет також використовується для розрахунків спектрів ЯМР та тензорів хімічного зсуву.

15	LAMMPS	Методи класичної молекулярної динаміки	Моделювання та розрахунки полімерів, біомолекул, твердих речовин, а також крупнозернистих мезоскопічних систем в атомному, мезоскопічному та континуальному масштабах.
16	MacroModel	Моделі силових полів	Розрахунок молекулярних систем, включаючи молекулярні конформації, рух молекул, міжмолекулярні взаємодії, зокрема, у системах ліганд-рецептор.
17	TINKER	Силові поля: MM2, MM3, AMBER та ін.	Оптимізація геометрії молекул, знаходження геометрії перехідних станів тощо. буд. Можливе моделювання великих біологічних молекул.
Моделювання у молекулярній динаміці. Інтегровані пакети програм			
18	Chem3D	Розширений метод Хюкеля. Силові поля MM2, MMFF94	Моделювання молекулярних структур та графічна візуалізація молекул та білків, що беруть участь у хімічних та біологічних процесах.

19	HyperChem	Розрахунки «з перших принципів». Напівемпіричні методи. Методи моделювання молекулярної механіки та динаміки	Комплекс має розвинені засоби візуалізації, які можуть використовуватися як при підготовці вхідної інформації (структури молекули), так і при аналізі результатів. Дозволяють у наочній формі досліджувати властивості біомолекул та їх систем.
20	NWChem	Квантово-механічні методи «з перших принципів», напівемпіричні методи, методи молекулярної механіки та динаміки, методи Монте-Карло.	Призначений для розрахунків як на високопродуктивних паралельних суперкомп'ютерах, так і для звичайних кластерів робочих станцій.
21	SPARTAN	Методи молекулярної механіки (силові поля SYBYL та MMFF94); напівемпіричні методи квантової хімії (MNDO, AMI, RM1 та PM3)	Комплекс має розвинені графічні засоби GUI і має інтерфейси з іншими програмами.
22	Materials Studio	Напівемпіричні методи, методи розрахунку «з перших принципів» та молекулярної динаміки.	Квантово-механічні розрахунки та комп'ютерне моделювання наноматеріалів.
23	Atomistix Toolkit/Virtual NanoLab	Квантово-хімічні методи моделювання, включаючи методи нерівноважної функції Гріна та теорії функціоналу щільності	Моделювання різних атомних, молекулярних структур і наносистем, визначення їх фундаментальних властивостей (структура електронних рівнів, концентрація носіїв та інших.), і найважливіших експлуатаційних властивостей (електропровідність, оптичні параметри та інших.).

4.5. Методологія подання багатовимірних функцій у вигляді таблиць та автоматизованої побудови графіків цих функцій з використанням ЕОМ

Останніми роками різко зріс динамізм довкілля, збільшилася кількість альтернативних варіантів вибору рішення, зросла складність кожного з варіантів прийнятих рішень, збільшився взаємозв'язок рішень та його наслідків. Тому сучасний керівник повинен вміти використовувати для прийняття основних управлінських рішень можливості ЕОМ, новітніх методів та моделей. Таку можливість прогнозувати ситуацію при зміні багатьох змінних величин надають сучасні електронні таблиці та графіки [11, 15, 17, 19].

Графічний спосіб завдання функцій одна із найбільш уживаних. Пояснюється це його перевагами, які полягають, насамперед, у наочності зображення функції, у можливості легкого її огляду загалом, у безперервному значенні аргументу. Однак застосовувані в цьому підходи та способи графічної побудови функцій просторів, що мають розмірність вище за тривимірний простір, ще не використовуються без поділу на графіки залежності від окремих змінних [10, 12, 14, 16, 19].

Відомі з літературних джерел прийоми побудови графіків функцій багатьох змінних забезпечують побудову функцій просторів, що мають розмірність не вище за тривимірний. При побудові графіків чотиривимірного та вище просторів використовуються їх поділ на графіки залежностей від окремих компонентів, при цьому майже повністю втрачається наочність та можливість огляду функції в цілому.

Метою наших досліджень була розробка нової методології представлення багатовимірних функцій у вигляді таблиць та автоматизованої побудови графіків цих функцій з використанням ЕОМ.

Поставлена мета визначила необхідність вирішення наступних задач: 1. Побудова таблиць та графіків функцій багатьох змінних, мають лінійну структуру. 2. Побудова таблиць та графіків функцій багатьох змінних, які мають довільну структуру.

Відповідно до запропонованого способу [24] кожному вузлу інтерполяції функції, в яких ця функція визначена, надається номер, складений так, щоб його цифрове значення несло інформацію про координати цього вузла інтерполяції. У свою чергу, кожному вузлу інтерполяції ставиться у відповідність певне значення багатовимірної функції. Такий підхід дозволяє скласти таблицю багатовимірної функції як прямокутника, т. е. привести многовходовую таблицю до таблиці з подвійним входом.

Для складання номера відповідного вузла інтерполяції доцільно використовувати позиційну систему запису, коли значення цифри чи числа залежить від займаного ними місця у номері вузла від своїх позиції. Так, у табл. 3 адрес функцій двох змінних у верхньому рядку представлена перша позиція номера L_1 , Що в номері вузла інтерполяції займає крайнє праве

становище.

Значення цифри цієї позиції несе однозначну інформацію про координати вузла по осі першою змінною X_1 . У лівому стовпці таблиці розташовані цифри другої позиції номера інтерполяції L_2 . Відповідно вони містять у собі інформацію про координату вузла по осі другої змінної X_2 У перетині відповідних рядків та стовпців записані номери вузлів інтерполяції функції двох змінних.

Таблиця 3. Адреси функцій двох змінних

$\backslash, L_2$ $L_1 \backslash$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	1	2	3	4	1 5	6	7	8	9
1	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
2	20 1	21	22	23	24	25	26	27	28	29
3	30	31	32	33	34	35 35	36	37	38	39
4	40 1	41	42	43	44	45	46	47	48	49 49
5	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59 59
6	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69
7	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79
8	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89
9	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99

Вочевидь, що у робочі таблиці записуються не номери вузлів, а значення функцій, які відповідають цим номерам. Сам номер вузла легко визначається за цифрами першої і другої позиції. Таким чином, номер вузла інтерполяції служить як би адресою, за якою розташоване певне значення функції.

Розглянутий принцип запису номерів вузлів інтерполяції та складання таблиць може бути легко поширений на функції більшої кількості аргументів.

У табл. 4 представлена таблиця адрес функції трьох змінних.

Таблиця 4. Адреси функцій трьох змінних

$\backslash, L_3$ $L_2 \backslash L_1$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1-0	¹ F ₀₀	101	102	103	104	105	106	107	108	109
1-1	110	111	112	1113	114	115	116	117	118	119
1-2	120	121	122	123	124	L-125	126	127	128	129
1-3	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139
1-4	₁ 140	141	142	143	144	145	146	147	148	149
1-5	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159
1-6	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169
1-7	170	171	172	₁ J73	174	175	176	177	178	179
1-8	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189
1-9	190	191	192	193	194	195	196	197	198	199

Вона відрізняється від попередніх тим, що у лівому стовпці таблиці зліва від цифри другої позиції L_2 , представлені цифри третьої позиції L_3 . У таблиці функції чотирьох змінних позиції L_1 можна розташувати у верхньому рядку, а позиції L_2, L_3 і L_4 у лівому стовпці. Номер вузла інтерполяції визначається

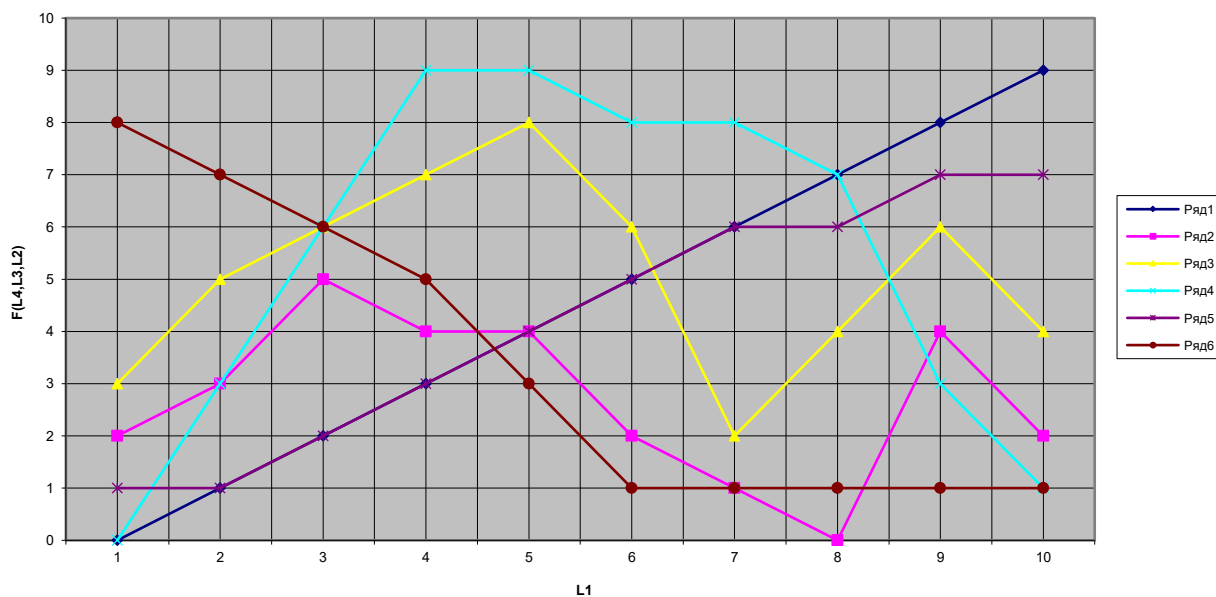


Рис. 19. Графік функції чотирьох змінних

Одним із можливих застосувань розглянутих таблиць та графіків багатовимірних функцій, можливо, побудова номограм цих функцій. Можна припустити, що номограми, побудовані як графіки функцій багатьох змінних, матимуть такі переваги:

1. Номографовану залежність не потрібно призводити до виду, що номографується. Оскільки деякі аналітичні висловлювання взагалі не можливо привести до такого виду, то ця перевага є дуже важливою.
2. Усі номограми цього мають однаковий ключ, однаковий алгоритм і тому не потрібно попереднього вивчення інструкцій і схем користування, що дозволяє ще більше скоротити час розрахунків.

Усі проміжні значення координат вузла та відповідне значення функції знаходяться шляхом інтерполяції.

Результати проведених автором, досліджень переконливо показують, що запропоновані способи табличного подання та побудови графіків функцій багатьох змінних, поряд зі скороченням пам'яті, що займається в ЕОМ, забезпечують автоматизацію побудови графіків функції багатьох змінних у двовимірній площині.

Останніми роками різко зріс динамізм довкілля, збільшилася кількість альтернативних варіантів вибору рішення, зросла складність кожного з варіантів прийнятих рішень, збільшився взаємозв'язок рішень та його наслідків. У умовах керівник будь-якого рангу повинен вміти швидко сприймати що надходить інформацію, глибоко її аналізувати, своєчасно приймати обґрунтоване рішення, чітко ставити завдання, організовувати і підтримувати взаємодія, передбачати перебіг подій і заздалегідь розробляти заходи, створені задля забезпечення і рішучих дій підпорядкованого підрозділи. Тому сучасний керівник має вміти використовуватиме прийняття

обґрунтованих управлінських рішень можливості ЕОМ, нових математичних методів і моделей. Таку можливість прогнозувати ситуацію,

Збільшення номенклатури продукції, підвищення її якості та різке скорочення термінів проектування неможливі без розробки нових підходів до проектування. Зростаючі потреби в інформаційно-обчислювальних ресурсах, нова технічна база, накопичений досвід експлуатації обчислювальних центрів та мереж ЕОМ потребують подальшого вдосконалення організаційних форм застосування обчислювальної техніки.

Графічний спосіб завдання функцій одна із найбільш уживаних. Пояснюється це його перевагами, які полягають насамперед у наочності зображення функції, у можливості легкого її огляду загалом у безперервному значенні аргументу. Однак застосовувані в цьому підходи та способи графічної побудови функцій просторів, що мають розмірність вище за тривимірний простір, ще не використовуються без поділу на графіки залежностей від окремих змінних.

Відомі з літературних джерел [15, 18, 19] прийоми побудови графіків функцій багатьох змінних забезпечують побудову функцій просторів, що мають розмірність не вище за тривимірний. При побудові графіків чотиривимірного та вище просторів використовується їх поділ на графіки залежностей від окремих компонентів, при цьому майже повністю втрачається наочність та можливість огляду функції в цілому.

У роботі викладається розроблений нами спосіб проектування перерізів багатовимірної функції побудови її графіка. Для кращого розуміння сутності запропонованого способу розглянемо визначення положення деякої точки M тривимірному просторі. Для простоти та визначеності скористаємося аксонометрією з рівними коефіцієнтами спотворення, тобто ізометрією. Як відомо, у цьому випадку три аксонометричні осі X_1, X_2, X_3 утворюють між собою кути по 60° . Для кожної точки M простору можна знайти три числа, які будуть її координатами. І назад, кожним трьом числам можна поставити у відповідність певну точку простору. Існує таким чином взаємно однозначна відповідність між точками тривимірного простору та координатами цих точок, виражених трьома числами.

Якщо задати аксонометричні масштаби $e'_{x_1} = e'_{x_2} = e'_{x_3}$ і координати точки M у просторі, то для певного положення цієї точки на аксонометричному кресленні достатньо побудувати одну з наступних аксонометричних координатних ламаних (рис. 20): $O'M'_{x_1}M'_1M'$; $O'M'_{x_2}M'_2M'$; $O'M'_{x_2}M'_1M'$; $O'M'_{x_2}M'_3M'$; $O'M'_{x_3}M'_2M'$; $O'M'_{x_3}M'_3M'$. Щоб на аксонометричному кресленні побудувати, припустимо, ламану $O'M'_{x_1}M'_1M'$, необхідно зробити наступне:

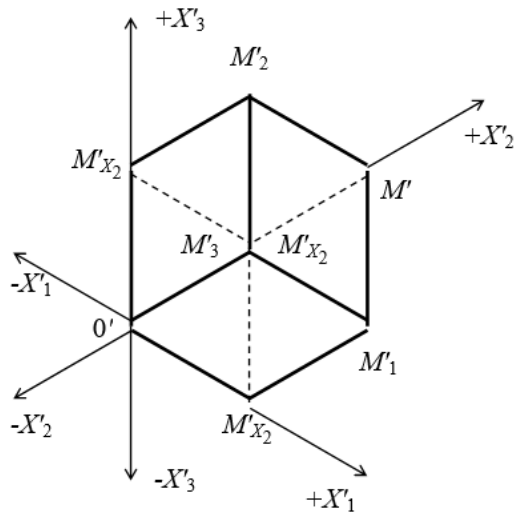


Рис. 20. Проекція куба на площину креслення

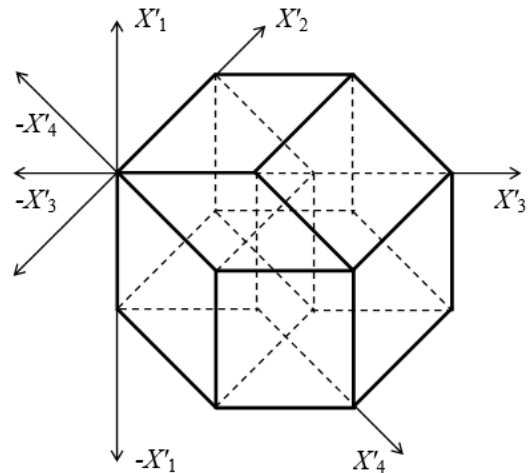


Рис. 21. Проекція чотиривимірного куба на площину креслення

- з точки O' по осі X_1 у вибраному масштабі відкласти відрізок, що дорівнює координаті $x_1 e'_{x_1}$ та отримати точку M'_{x_1} ; з точки M'_{x_1} Паралельно осі X_2 побудувати відрізок, що дорівнює координаті $x_2 e'_{x_2}$ і знайти точку M'_1 ; знайти точку M' відклавши відрізок $M'_1 M$ рівний координаті $x_3 e'_{x_3}$ та паралельний осі X_3 .

Якщо аналогічним чином побудувати решту п'яти координатних ламаних, вони утворюють на аксонометрическом кресленні плоску фігуру $O'M'_{x_1}M'_1M'_{x_2}M'_2M'_{x_3}M'_3M'$, що зображує проєкцію куба на площину креслення. Зауважимо, що положення точки M' на аксонометричному кресленні може бути знайдено при побудові будь-якої шести координатних ламаних.

У чотиривимірному просторі з'являється ще четверта координатна вісь X_4 , перпендикулярна решті трьох. Якщо, як і раніше, використовувати ізометрію, то проєкції осей на площину креслення утворюють між собою рівні кути, які визначаються за формулою: $180/(n+1)$, де n – кількість змінних.

При $n = 4$, кути між осями дорівнюватимуть 36° . Побудувавши будь-яку координат ламаних, знайдемо положення точки M' на аксонометрическом кресленні. Порядок побудови ламаної аналогічний прийнятому раніше для тривимірного простору, а саме: з точки O' по осі X'_1 відкладемо відрізок рівний координаті $x_1 e'_{x_1}$ і отримаємо точку M'_{x_1} , з точки M'_{x_1} паралельно осі X'_2 відкладаємо відрізок, рівний координаті $x_2 e'_{x_2}$ і знайдемо точку M'_1 ; паралельно X'_3 осі з точки M'_1 відкладемо відрізок, рівний координаті $x_3 e'_{x_3}$ визначивши точку M'_2 ; точку M' знайдемо, побудуємо відрізок рівний координаті $x_4 e'_{x_4}$ та паралельної осі X'_4 .

Побудувавши всі координатні ламані, отримаємо проєкцію чотиривимірного надкуба на площину креслення (рис. 21). У отриманій фігури

число вершин $N_0 = 16$, число ребер $N_1 = 32$, число двомірних граней $N_2 = 24$ число тривимірних граней $N_3 = 8$.

Пропонований спосіб можна легко поширити на багато змінних. Як приклад розглянемо побудову п'ятивимірного надкуба. Координати п'ятивимірного надкуба запишемо в двійковій системі (табл. 6).

Таблиця 6. Координати п'ятивимірного надкубу

x_5	0	0	0	0	0	...	1	1	1	1	1
x_4	0	0	0	0	0	...	1	1	1	1	1
x_3	0	0	0	0	1	...	0	1	1	1	1
x_2	0	0	1	1	0	...	1	0	0	1	1
x_1	0	1	0	1	0	...	1	0	1	0	1

Запис у табл. 6 по стовпцям відповідає запису чисел 0, 1, 2, 3, 4, 5, ..., 27, 28, 29, 30, 31 у двійковій системі числення.

Напрямки проекцій п'яти осей координат виберемо довільними, але так, щоб дотримувалася умова $X_1 \perp X_3$ і $X_4 \perp X_2$. Ця умова введена для того, щоб отримати окремі грані фігури у вигляді неспотворених прямокутників. Щоб при побудові ребер не вийти за межі побудови фігури, доцільно спочатку побудувати граничний контур. Граничний контур багатовимірної фігури отримаємо, відклавши послідовно з точки (рис. 22) відрізки, рівні 1 і паралельні осям координат. В результаті отримаємо ламані 0, 1, 3, 7, 15, 31 та 0, 16, 24, 28, 30, 31, які складуть граничний контур п'ятивимірного надкуба. Потім наносимо всі інші вершини координатами таблиці 5. Тепер залишається тільки з'єднати вершини так, щоб від кожної з них відходило по п'ять ребер, паралельних осям координат. Таким чином, отримаємо проекцію п'ятивимірного надкуба на площині креслення. Отримана фігура має $N_0 = 32$ вершини, $N_1 = 80$ ребер, $N_2 = 80$ квадратів, $N_3 = 40$ кубів,

Ці дані задовольняють формулі Ейлера для будь-якого опуклого надбагатогранника в n -мірному просторі, яка має вигляд:

$$E = N_0 - N_1 + N_2 - \dots + (-1)^{n-1} N_{n-1}, \quad (22)$$

де E – характеристика Ейлера, що дорівнює 0 для парних значень та 1 для непарних значень.

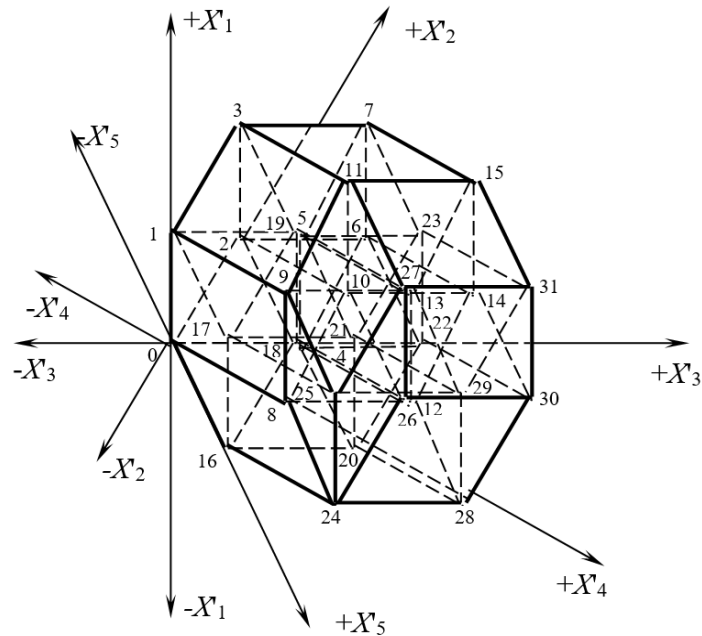


Рис. 22. Проекція п'ятивимірного надкуба на площину креслення

Побудову багатовимірних фігур прямокутної структури можна здійснювати і не вдаючись до таблиць координат. Для цього спочатку будується граничний контур, потім з кожної вершини контуру в масштабі паралельно осям будуються ребра. З новоутворених вершин будується паралельно осям наступна група ребер і т. д., доки з кожної вершини не виходитиме n ребер паралельних n осям координат.

Розглянемо тепер прийоми побудови графіків функцій багатьох змінних, мають нелінійну (довільну) структуру.

Побудова проекції функції n змінних можна проводити у вигляді перерізів за незалежними змінними. Залежно від характеру функцій вибирається з кожної осі необхідний крок. Побудувавши описаним вище способом за заданими або розрахованими координатами всі перерізи по кожній осі, отримаємо проекцію графіка функції багатьох змінних на площину креслення.

Проілюструємо сказане на прикладах. Спочатку проведемо шиккування у тривимірному просторі.

Ці дані задовольняють формулі Ейлера для будь-якого опуклого надбагатогранника в n -мірному просторі, яка має вигляд:

$$E = N_0 - N_1 + N_2 - \dots + (-1)^{n-1} N_{n-1}, \quad (23)$$

де E – характеристика Ейлера, що дорівнює 0 для парних значень та 1 для непарних значень.

Побудову багатовимірних фігур прямокутної структури можна здійснювати і не вдаючись до таблиць координат. Для цього спочатку будується граничний контур, потім з кожної вершини контуру в масштабі паралельно осям будуються ребра. З новоутворених вершин будується паралельно осям наступна група ребер і т. д., доки з кожної вершини не

виходитиме n ребер паралельних n осям координат.

Розглянемо тепер прийоми побудови графіків функцій багатьох змінних, мають нелінійну (довільну) структуру.

Побудова проекції функції n змінних можна проводити у вигляді перерізів за незалежними змінними. Залежно від характеру функцій вибирається з кожної осі необхідний крок. Побудувавши описаним вище способом за заданими або розрахованими координатами всі перерізи по кожній осі, отримаємо проекцію графіка функції багатьох змінних на площину креслення.

Проілюструємо сказане на прикладах. Спочатку проведемо шиккування у тривимірному просторі.

Рівняння другого ступеня

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = R \quad (24)$$

представляє сферу радіусу R з центром на початку координат. Розв'яжемо це рівняння щодо x_1 , тобто x_1 приймаємо за вісь вихідної величини:

$$x_1 = \pm \sqrt{R^2 - x_2^2 - x_3^2}.$$

Складемо таблицю для окремих перерізів:

Таблиця 6. Координати перерізів для варіантів залежностей

Для першого перерізу, при $x_3 = 0$	$\pm x_2$	0	1,0	2,0	2,5	3,0
	$\pm x_1$	3,0	2,83	2,24	1,66	0
Для II-го перерізу, при $x_3 = \pm 1$	$\pm x_2$	0	1,0	2,0	2,5	2,83
	$\pm x_1$	2,83	2,65	2,0	1,32	0
Для III-го перерізу, при $x_3 = \pm 2$	$\pm x_2$	0	1,0	1,65	2,0	2,24
	$\pm x_1$	2,24	2,0	1,5	1,0	0
Для IV-го перерізу	$\pm x_2$	0	1,0	1,66		
	$\pm x_1$	1,66	1,32	0		

При $x_3 = 3$, $x_2 = 0$ та $x_1 = 0$.

За даними табл. 6 побудуємо графіки проекцій перерізів. Для цього скористаємося системою координат, що має три осі, розташованих по відношенню один до одного під однаковими кутами, що визначаються за наведеною вище формулою і рівними 60° .

Легко визначити, що для трьох змінних може бути лише шість варіантів:

1. $x_1 = f(x_2)$, при $x_3 = \text{const}$;
2. $x_1 = f(x_3)$, при $x_2 = \text{const}$;
3. $x_2 = f(x_1)$, при $x_3 = \text{const}$;
4. $x_2 = f(x_3)$, при $x_1 = \text{const}$;
5. $x_3 = f(x_1)$, при $x_2 = \text{const}$;
6. $x_3 = f(x_2)$ при $x_1 = \text{const}$.

Аналітичний вираз чотиривимірної сфери має вигляд:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = R^2. \quad (25)$$

Дозволивши це рівняння щодо будь-якої із змінних, поклавши при цьому всі інші змінні постійним значенням, складемо таблицю перерізів для дванадцяти варіантів залежностей. Вочевидь, що у випадку кількості варіантів визначатиметься числом розміщень з n елементів (за кількістю змінних) по два.

Доцільно в даному випадку для побудови проєкцій чотиривимірної сфери з варіантів вибрати ті, при яких перерізи проєктуються на площину у вигляді кіл, а не у вигляді еліпсів. Для ізометричної проєкції чотирьох осей, які розташовуються на кресленні під кутом 45° стосовно один одного $x_1 \perp x_3$, а вісь $x_2 \perp x_4$, отже проєкції перерізів, побудовані залежно:

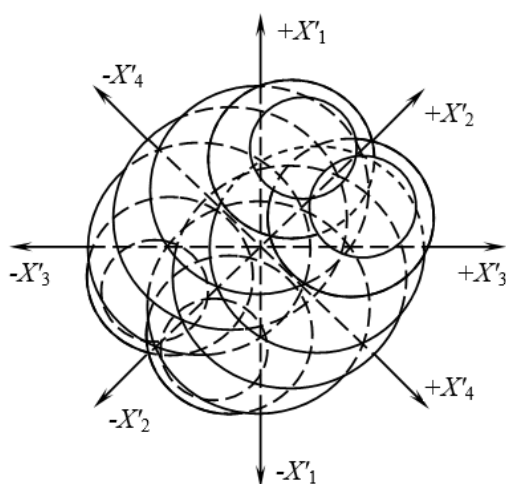


Рис. 23. Частина чотиривимірної сфери $x_1 = f(x_3)$ при $x_2 = 0; \pm 1; \pm 2$

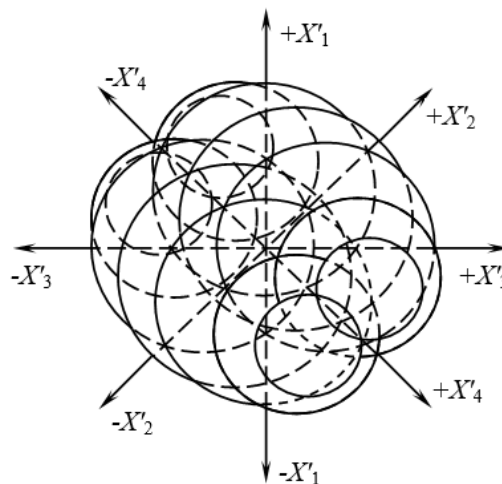


Рис. 24. Частина чотиривимірної сфери $x_1 = f(x_3)$ при $x_2 = \pm 1; x_4 = 0; \pm 1; \pm 2$

$x_1 = f(x_3)$, при $x_2 = \text{const}$ та $x_4 = \text{const}$;
 $x_2 = f(x_4)$, при $x_1 = \text{const}$ та $x_3 = \text{const}$;
 $x_3 = f(x_1)$, при $x_2 = \text{const}$ та $x_4 = \text{const}$;
 $x_4 = f(x_2)$, при $x_1 = \text{const}$ та $x_3 = \text{const}$

проєктуються на креслення у вигляді кіл.

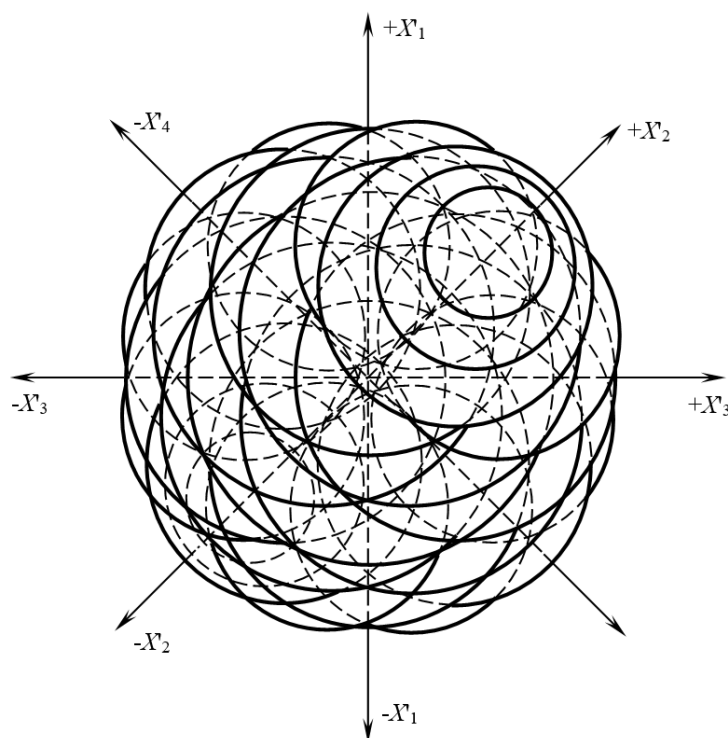


Рис. 25. Чотиривимірна сфера у вигляді проекцій її перерізів на площину креслення

Для отримання заданої проекції необхідно і достатньо, щоб кожна із незалежних змінних приймала на замкнутому просторі із заданим кроком сукупність усіх своїх значень, при яких формується задана область визначення багатовимірної функції. Іншими словами, необхідне і відтворення одного з варіантів.

У разі скористаємося варіантами залежності $x_1 = f(x_3)$, при $x_2 = \text{const}$ і $x_4 = \text{const}$. Побудова проекцій багатовимірної функції доцільно проводити окремими частинами.

На рис. 23 $x_1 = f(x_3)$ при $x_2 = \pm 0, 1; \pm 2$.

На рис. 24 $x_1 = f(x_3)$ при $x_2 = \pm 1; x_4 = \pm 0, 1; \pm 4$.

Якщо поєднати всі ці малюнки, то отримаємо шукану проекцію чотиривимірної сфери у вигляді проекцій її перерізів на площину креслення (рис. 25).

Усі проміжні точки між лініями перерізів за необхідності можуть бути знайдені шляхом інтерполяції. Цей спосіб побудови може бути поширена на функції n -мірних просторів.

Контрольні питання

1. Що таке багатомасштабне моделювання матеріалів та процесів?
2. Які проблеми виникають при використанні комп'ютерного моделювання для наносистем?
3. На які групи можна поділити методи багатомасштабного

модельовання?

4. Назвіть три різні аспекти проблеми масштабування у методах розрахунку та аналізу характеристик наносистем.

5. Які експериментальні та розрахункові методи використовуються залежно від змін тимчасового та просторового масштабів?

6. За яких величин наночастинок застосовні напівемпіричні методи модельовання?

7. Які основні програмні продукти для модельовання нанорозмірних структур ви знаєте?

ВИСНОВОК

Математичне моделювання дозволяє досліджувати та прогнозувати управлінські, виробничі, економічні, біологічні та інші системи та явища за допомогою математичних моделей мікро- та макрорівнів. Математична модель є формалізованим описом системи (або процесу) математичною мовою, наприклад, у вигляді сукупності математичних співвідношень або схеми алгоритму, тобто такий математичний опис, який забезпечує імітацію роботи систем або процесу на рівні, досить близькому до їхньої реальної поведінки систем чи процесів. Будь-яка математична модель описує реальний об'єкт, явище чи процес із деяким ступенем наближення до дійсності.

В основі вирішення практичних завдань лежить наукова база, пов'язана з побудовою математичної моделі, вибором та реалізацією математичного методу, який використовує цю модель.

У навчальному посібнику розглянуто:

- основи математичного моделювання, класифікація видів моделювання та економіко-математичних моделей, етапи математичного моделювання;
- теоретичні та практичні основи, пов'язані з математичним моделюванням;
- моделі динамічного моделювання та управління запасами;
- теоретичні та практичні питання, пов'язані з побудовою та використанням трендових та регресійних моделей, кореляційно-регресійного аналізу;
- основні поняття імітаційного моделювання, технологічні етапи, питання призначення та моделювання, планування та проведення експерименту.

В результаті вивчення даного навчального посібника, той, хто навчається, отримає теоретичні та практичні знання в галузі математичного моделювання.

Однак успіх у використанні математичного апарату від формулювання завдання до отримання рішення багато в чому залежить від творчих здібностей, інтуїції, досвіду фахівця, який вирішує завдання.

Навчальний посібник допоможе учням:

- освоїти сучасні математичні моделі аналізу та наукового прогнозування поведінки економічних об'єктів та явищ;
- застосовувати системний підхід та математичні моделі у формалізації вирішення прикладних завдань;
- сформулювати систему основних понять, що використовуються для опису найважливіших математичних моделей та математичних методів, та розкриття взаємозв'язку цих понять;
- розвинути логічне мислення, набути навичок математичного дослідження явищ і процесів, пов'язаних з виробничою діяльністю;
- сформулювати навички самостійної роботи, організації дослідницької роботи.

Подальший розвиток теоретичних та практичних знань з математичного

моделювання учні можуть отримати під час використання видань з конкретизацією алгоритмів рішення, у тому числі з використанням сучасних програмних засобів на комп'ютері.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ажогін В.В., Згуровський М.З. Моделювання на цифрових, аналогових та гібридних ЕОМ. К. "Вища школа", 2019. 279с.
2. Лебедев О.М. Моделювання у науково-технічних дослідженнях. К. "Вища школа", 2019. 224с.
3. Моржов В.І. Математичне моделювання систем та процесів. Лабораторний практикум К. НАУ, 2018. 46с.
4. Андреева, Л. В. Математичне моделювання в економіці / Л. В. Андреева, О. Г. Морозова, Т. А. Сидорова. Київ: Кно, 2022. 248 с.
5. Бойко, А. С. Математичне моделювання в управлінні якістю / А. С. Бойко, В. Н. Воробьев, А. В. Гаврилов. Київ: ИНФРА, 2023. 304 с.
6. Гаврилов, А. В. Математичне моделювання в екології / А. В. Гаврилов, Ю. В. Войцеховский, Д. А. Шиманский. Київ:, 2021. 280 с.
7. Гладкий, С. І. Математичне моделювання в біології / С. І. Гладкий. Київ: Юрайт, 2022. 288 с.
8. Гусев, А. В. Математичне моделювання в техніці / А. В. Гусев, С. В. Гусев. Київ: Юрайт, 2023. 352 с.
9. Лебідь Р.Д. Математичні методи моделювання систем. Навчальний посібник. К. КМУЦА, 2020. 158с.
10. Кузьмін В. В. Математичне моделювання технологічних процесів збирання та механічної обробки виробів машинобудування: підручник для вузів / В. В. Кузьмін [та ін.]. К. "Вища школа" 2018. 279 с.
11. Ашихмін В. Н. Введення в математичне моделювання: навчальний посібник / В. Н. Ашихмін [та ін.]; за ред. П. В. Трусова. К. "Вища школа", 2015. 440 с.
12. Рад Б. Я. Моделювання систем: підручник для вузів / Б. Я. Рад, С. А. Яковлев. 3-тє вид., Перероб і доп. К: Вища школа, 2021. 343 с.
13. Дьяконов В. П. Нові інформаційні технології: навчальний посібник / В. П. Дьяконов [та ін.]; за ред. В. П. Дьяконова. К. "Вища школа", 2015. 640 с.
14. Дулов В. Г. Математичне моделювання в сучасному природознавстві: навчальний посібник/В. Г. Дулов, В. А. Цибаров; за ред. В. Г. Дулова. К. "Вища школа", 2015. 244 с.
15. Зарубін В. С. Математичне моделювання в техніці: підручник для вузів / В. С. Зарубін [та ін.]; за ред. В. С. Зарубіна. К. КМУЦА, 2020. 496 с.
16. Корн Г. Довідник з математики для науковців та інженерів / Г. Корн, Т. Корн. К. КМУЦА, 2020. 830 з.
17. Рогов В. А. Методика та практика технічних експериментів: навчальний посібник / В. А. Рогов. К: Академія, 2015. 288 с.
18. Дрейпер Н. Прикладний регресійний аналіз: переклад з англійської/Н. Дрейпер, Г. Сміт. 3-тє вид К. КМУЦА, 2020. 912 с.
19. Адлер Ю. П. Теорія експерименту: минуле, сучасне, майбутнє / Ю. П. Адлер, Ю. В. Грановський, Є. В. Макарова. К. "Вища школа", 2015. 64 с.

20. Цирлін А. М. Оптимальне управління технологічними процесами/А. М. Цирлін. К. "Вища школа", 2015. 400 с.
21. Ногін В. Ю. Основи теорії оптимізації / В. Ю. Ногін, І. О. Протодьяконів, І. І. Євlampієв. К. "Вища школа", 2018. 384 с.
22. Бойко, О. С. Математичне моделювання процесу управління якістю продукції / О. С. Бойко, В. М. Воробйов, О. В. Гаврилов // Вісник НТУ «ХП». Серія: Машинобудування та матеріалознавство. 2022. № 1. С. 101-108.
23. Гаврилов, О. В. Математичне моделювання процесу забруднення довкілля / О. В. Гаврилов, Ю. В. Войцеховський // Екологія та промисловість України. 2021. № 10. С. 58-63.
24. Гладкий, С. И. Математическое моделирование процесса роста популяции / С. И. Гладкий // Вісник Львівського університету. Серія: Біологія. 2022. Т. 78, № 2. С. 139-147.
25. Гусев, А. В. Математическое моделирование процесса работы двигателя внутреннего сгорания / А. В. Гусев, С. В. Гусев // Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія: Фізика. 2023. Т. 68, № 1. С. 37-44.