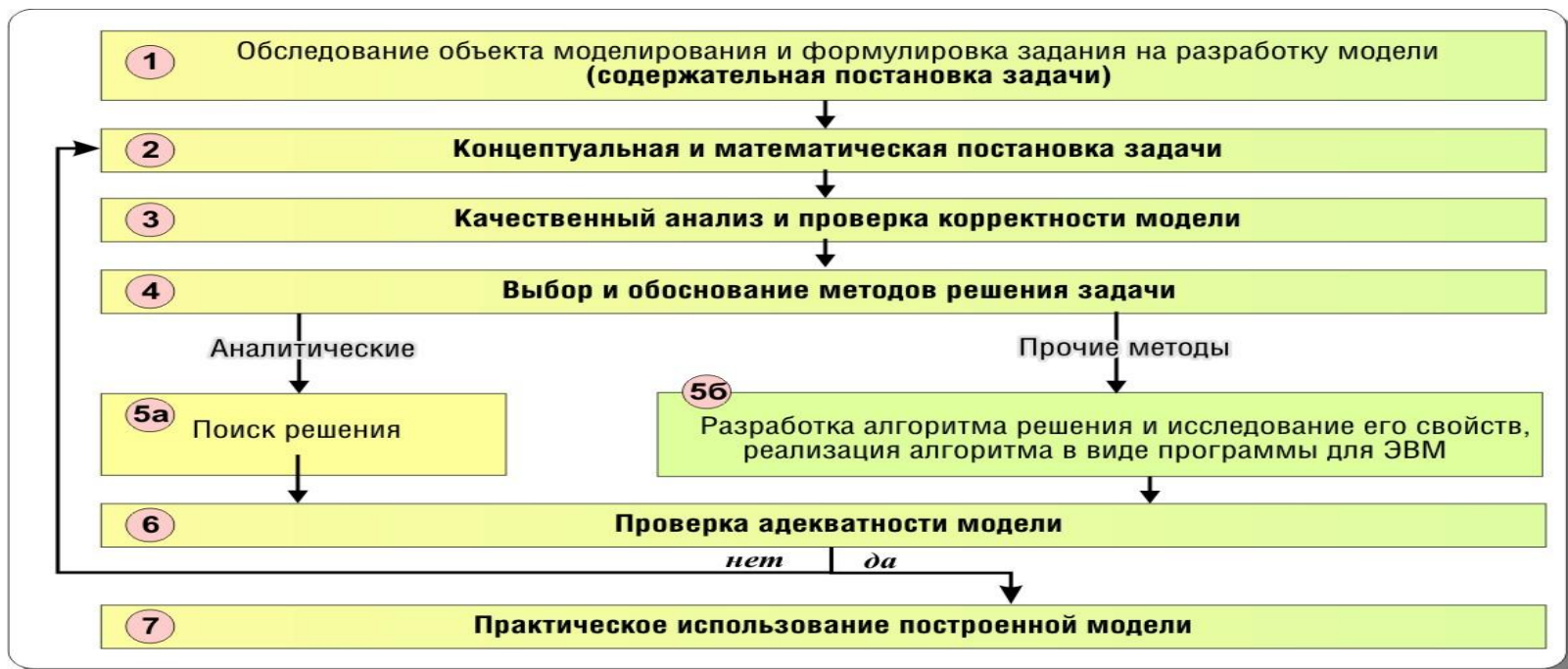


Тема 1. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Вычислительным экспериментом (ВЭ) называется методология и технология исследований, основанная на применении прикладной математики и ЭВМ как технической базы математического моделирования.

Тема 1. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

План построения вычислительного эксперимента:



Этап 1. СОДЕРЖАТЕЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.

- ▣ **обследование объекта** моделирования с целью выявления **основных факторов, механизмов, влияющих на его поведение**, определения соответствующих параметров, позволяющих описывать объект;
- ▣ **сбор и анализ** имеющихся экспериментальных **данных об объектах-аналогах**, проведение при необходимости **дополнительных экспериментов**;
- ▣ **аналитический обзор литературных источников**, анализ и сравнение между собой построенных ранее моделей данного объекта (или подобных);
- ▣ анализ и обобщение всего накопленного материала, **разработка общего плана** создания математической модели.

Весь собранный в результате обследования материал о накопленных к данному моменту знаниях об объекте, дополнительные требования к реализации модели и представлению результатов оформляются в виде технического задания на проектирование и разработку модели.

Этап 1. СОДЕРЖАТЕЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.

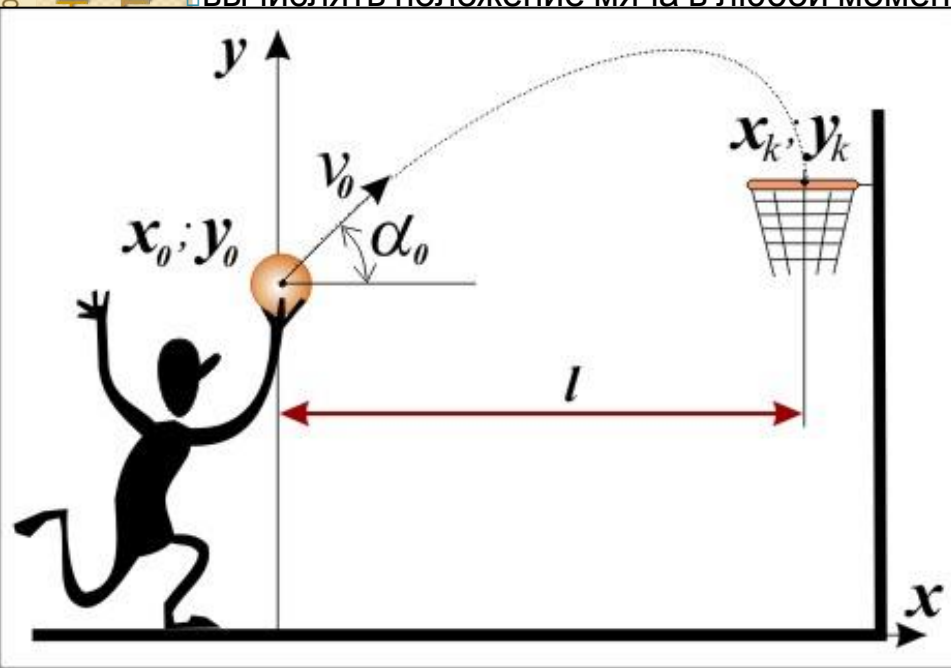
Пример. **Содержательная постановка задачи о баскетболисте.**

Разработать математическую модель, позволяющую описать полет баскетбольного мяча, брошенного игроком в баскетбольную корзину.

Модель должна позволять:

■ вычислять положение мяча в любой момент времени;

■ вычислять время полета мяча после броска при различных начальных условиях (начальной скорости и угле броска).



Этап 2. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Концептуальная (естественно-научная) формулируется на основании разра-ботанного на предыдущем этапе технического задания, с использованием имею-щихся знаний об объекте моделирования и требований к будущей модели.

Это сформулированный в ***терминах конкретных дисциплин*** (физики, механики, химии, биологии и т.д.) ***перечень основных вопросов***, интересующих заказчика, а также ***совокупность гипотез относительно свойств и закономерностей поведения объекта моделирования.***

Как правило, эти гипотезы правдоподобны в том смысле, что для их обоснования могут быть приведены некоторые теоретические доводы и использованы экспериментальные данные, основанные на собранной ранее информации об объекте.

На данном этапе учитывая опыт разработчиков может быть найдена существующая модель.

Наибольшие трудности при формулировке концептуальной постановки приходится преодолевать в моделях, находящихся на «стыке» различных дисциплин. Различия традиций, понятий и языков, используемых для описания одних и тех же объектов, являются очень серьезными препятствиями, возникающими при создании «междисциплинарных» моделей.

Этап 2. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Концептуальная постановка задачи о баскетболисте.

Движение баскетбольного мяча может быть описано в соответствии с законами классической механики Ньютона.

Примем следующие гипотезы:

- ▣ объектом моделирования является мяч – *шар радиуса R*
- ▣ мяч будем считать *материальной точкой массой m* положение которой совпадает с центром масс мяча;
- ▣ движение происходит в *поле сил тяжести с постоянным ускорением свободного падения g* и описывается *уравнениями классической механики Ньютона;*

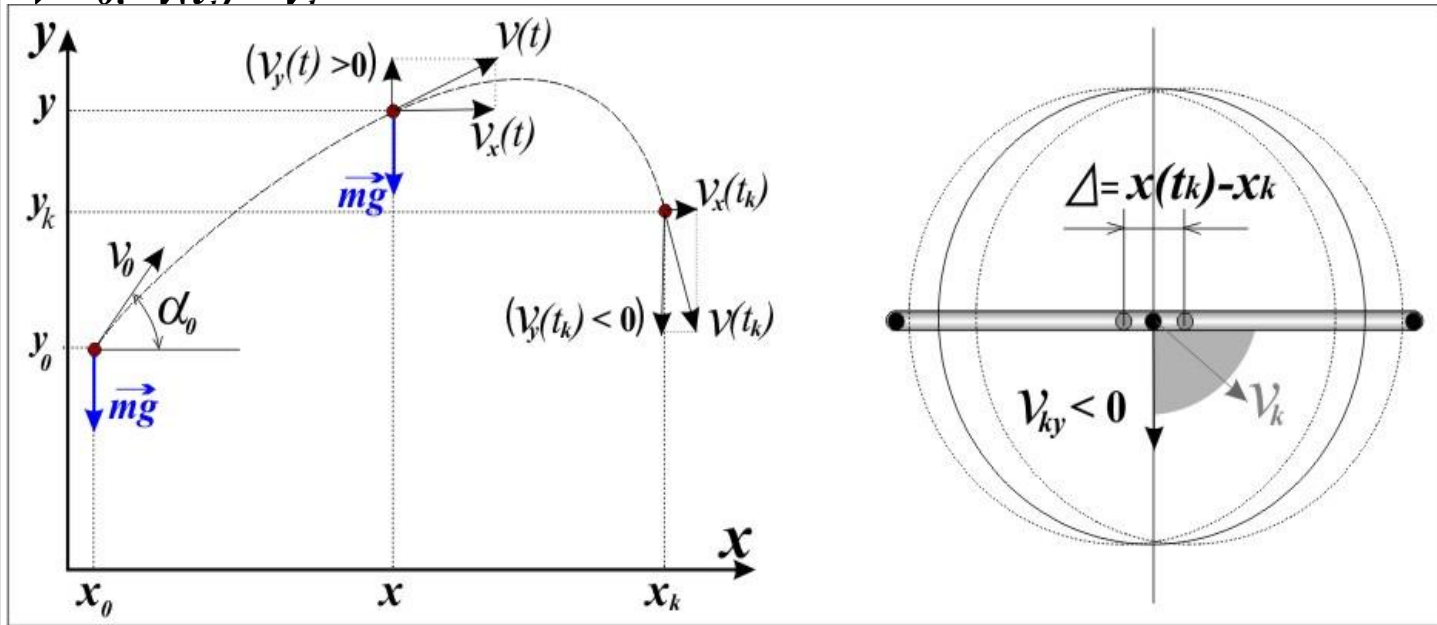
$$\boxed{ma = F}$$

- ▣ движение мяча происходит в *одной плоскости, перпендикулярной поверхности Земли и проходящей через точку броска и центр корзины;*
- ▣ *пренебрегаем сопротивлением воздуха и возмущениями, вызванными собственным вращением мяча вокруг центра масс.*

Этап 2. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Концептуальная постановка задачи о баскетболисте:

Определить закон движения материальной точки массой m под действием силы тяжести (mg), если известны начальные координаты точки x_0 и y_0 , её начальная скорость V_0 и угол броска α_0 . Центр корзины имеет координаты x_k и y_k . Вычислить точность броска $\Delta = x(t_k) - x_k$ где t_k определяется из условий: $t_k > 0$, $V_y < 0$, $v(t_k) = v$.



Этап 2. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Особенности приведенной в примере концептуальной постановки задачи.

- Первая из перечисленных гипотез особенно важна, так как она выделяет объект моделирования. В данном случае объект можно считать **простым**. Однако в качестве объекта моделирования можно рассматривать систему «**игрок - мяч - кольцо**». Требуемая для описания подобной системы модель будет уже намного сложнее, так как игрок в свою очередь представляет собой сложную биомеханическую систему и его моделирование является далеко не тривиальной задачей.
- Гипотеза о том, что мяч можно считать материальной точкой, широко применяется для исследования движений тел в механике. В нашем случае она оправдана в **силу симметрии формы мяча и малости его радиуса по сравнению с характерными расстояниями перемещения мяча**.
- Гипотезу о применимости в данном случае законов классической механики можно обосновать огромным экспериментальным материалом, связанным с изучением **движения тел вблизи поверхности Земли со скоростями много меньше скорости света**. Предположение о постоянстве ускорения свободного падения также представляется обоснованным. А вот если бы моделировалось движение баллистической ракеты, то пришлось бы учитывать изменение ускорения свободного падения в зависимости от высоты и широты места а также высокую скорость движения.

Этап 2. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Особенности приведенной в примере концептуальной постановки задачи.

- **Гипотеза о движении мяча в плоскости, перпендикулярной поверхности Земли, значительно упрощает модель.** Траектория мяча может не лежать в одной плоскости, если при броске он сильно подкручивается вокруг вертикальной оси. В этом случае поток воздуха, обтекающий мяч, становится не симметричным, и его траектория уже не будет лежать в одной плоскости.
- **Гипотеза об отсутствии влияния сопротивления воздуха наименее обоснована.** При движении тела в газе или жидкости сила сопротивления увеличивается с ростом скорости движения. Учитывая невысокие скорости движения мяча, его правильную обтекаемую форму и малые дальности бросков, указанная **гипотеза может быть принята в качестве первого приближения.**

Фактически в приведенном примере концептуальная постановка свелась к постановке классической задачи механики о движении материальной точки в поле сил тяжести.

Концептуальная постановка более абстрактна по отношению к содержательной, так как материальной точке можно сопоставить произвольный материальный объект, брошенный под углом к горизонту: футбольный мяч, ядро, камень или артиллерийский снаряд.

Этап 3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Задача любого вида сводится к математической задаче.

Р. Декарт

Математическая постановка задачи моделирования - это совокупность математических соотношений, описывающих поведение и свойства объекта моделирования.

Во многих областях знаний (механике, физике, биологии и т.д.) принято выделять законы, справедливые для всех объектов исследования данной области знаний, и соотношения, описывающие поведение отдельных объектов или их совокупностей.

К числу первых в физике и механике относятся, например, **уравнения баланса массы, количества движения, энергии** и т.д., справедливые при определенных условиях для любых материальных тел, независимо от их конкретного строения, структуры, состояния, химического состава. Уравнения этого класса подтверждены огромным количеством экспериментов, хорошо изучены и в силу этого применяются в соответствующих математических моделях как данность.

Определяющие соотношения - это основной элемент, «сердцевина» любой математической модели физико-механических процессов. Именно ошибки в выборе или установлении определяющих соотношений приводят к количественно неверным результатам моделирования.

Этап 3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Совокупность математических соотношений определяет оператор модели. В большинстве случаев оператор модели включает в себя систему обыкновенных дифференциальных уравнений, дифференциальных уравнений в частных производных и интегро-дифференциальных уравнений.

Для обеспечения **корректности** постановки задачи к системе уравнений добавляются **начальные или граничные условия**, которые, в свою очередь, могут быть алгебраическими или дифференциальными соотношениями различного порядка.

Математическая постановка задачи о баскетболисте.

$$\frac{dx}{dt} = V_x \quad m \frac{dV_x}{dt} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{dy}{dt} = V_y \quad m \frac{dV_y}{dt} = -mg \quad (2)$$

при начальных условиях

$$x(0) = x_0 \quad y(0) = y_0 \quad (3)$$

$$V_x(0) = V_0 \cos(\alpha_0) \quad V_y(0) = V_0 \sin(\alpha_0) \quad (4)$$

необходимая точность попадания

$$\Delta = x(t_k) - x_k \quad (5)$$

$$t_k > 0, \quad V_y(t_k) < 0, \quad y(t_k) = y_k \quad (6)$$

Л 02 рис 03

$V_x(t)$, $V_y(t)$ из решения системы уравнений является замкнутой, так как число дифференциальных и 2 алгебраических) равно n (числу переменных):

Этап 4. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ МОДЕЛИ.

Для контроля правильности полученной системы математических соотношений требуется проведение ряда обязательных проверок:

Контроль размерностей - приравниваться и складываться могут только величины одинаковой размерности.

$$m \frac{dv}{dt} = \sum F \Rightarrow [\hat{e}\tilde{a}] \frac{[\dot{i} / \tilde{n}]}{[\tilde{n}]} = [\dot{I}] \Rightarrow \left[\frac{\hat{e}\tilde{a} \cdot \dot{i}}{\tilde{n}^2} \right] \Rightarrow \left[\frac{\hat{e}\tilde{a} \cdot \dot{i}}{\tilde{n}^2} \right]$$

$$\frac{dx}{dt} = v \Rightarrow \frac{[\dot{i}]}{[\tilde{n}]} = \frac{[\dot{i}]}{[\tilde{n}]}$$

Контроль порядков, состоящий из грубой оценки порядков складываемых величин и исключением малозначимых параметров.

Контроль характера зависимостей заключается в проверке того, что **направление и скорость изменения выходных параметров** модели, вытекающие из математических соотношений, **такие, как это следует непосредственно из «физического» смысла изучаемой модели.**

Контроль экстремальных ситуаций - проверка того, какой вид принимают математические соотношения, а также результаты моделирования, если параметры модели или их комбинации приближаются к предельно допустимым значениям, чаще всего к нулю или бесконечности.

Контроль граничных условий - проверка того, что граничные условия действительно наложены, что они использованы в процессе построения искомого решения и что значения выходных параметров модели на самом деле удовлетворяют данным условиям.

Этап 4. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ МОДЕЛИ.

- ▣ **Контроль физического смысла** - проверка физического или иного смысла исходных и промежуточных соотношений.
- ▣ **Контроль математической замкнутости**, состоящий в проверке того, что выписанная система математических соотношений дает возможность, притом однозначно, решить поставленную математическую задачу.

Например: Задача свелась к отысканию n неизвестных из некоторой системы алгебраических уравнений, то контроль замкнутости состоит в проверке того, что число независимых уравнений должно быть n .

Если их меньше n , то надо установить недостающие уравнения, а если их больше n , то либо уравнения зависимы, либо при их составлении допущена ошибка.

Однако если уравнения получаются из эксперимента или в результате наблюдений, то возможна постановка задачи, при которой число уравнений превышает n но сами уравнения удовлетворяются лишь приближенно, а решение ищется, например, по методу наименьших квадратов.

Математическая модель является корректной, если для нее осуществлен и получен положительный результат всех контрольных проверок - размерности, порядков, характера зависимостей, экстремальных ситуаций, граничных условий, физического смысла и математической замкнутости.

Этап 4. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ МОДЕЛИ.

Из вышесказанного можно сделать следующее определение понятия **вычислительный эксперимент**.

Вычислительный эксперимент – это не однократное вычисление по некоторому набору формул, а многостадийный процесс математической модели объекта исследования разработки алгоритмов её решения, программирования, расчётов, анализа результатов и их погрешностей.

Задача $y = f(x)$ называется **корректно поставленной**, если для любых входных данных x из некоторого класса **существует единственное и устойчивое решение** y .

Отсутствие устойчивости обычно означает, что **сравнительно небольшой погрешности (входных параметров) δ_x соответствует весьма большая погрешность (выходных параметров) δ_y** , а значит получаемое решение будет далеко от

$$\begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700 \\ 100x_1 + 133x_2 = 233 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{Система} \\ \text{имеет решение} \end{array} \quad \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700 \\ 100x_1 + 132x_2 = 233 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{Система} \\ \text{имеет решение} \end{array} \quad \begin{cases} x_1 = -3 \\ x_2 = 4 \end{cases}$$

Л 02 рис 04

иводит к изменению решения в 300%.

екор-ректность математической

Этап 4. ВЫБОР И ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ.

Поиск решения задачи, как правило, сводится к **отысканию некоторых зависимостей искомых величин от исходных параметров** модели. Как было отмечено ранее, все методы решения задач, составляющих «ядро» математических моделей, можно подразделить на аналитические и алгоритмические (численные).

Аналитические методы более удобны для последующего анализа результатов, но применимы лишь для относительно простых моделей. В случае, если математическая задача **допускает аналитическое решение, оно, без сомнения, предпочтительнее численного.**

Алгоритмические (численные) методы сводятся к некоторому алгоритму, реализуемому вычислительный эксперимент с использованием ЭВМ. Точность решения в подобном эксперименте существенно зависит от выбранного метода и его параметров (например, шага интегрирования).

Общим для всех численных методов является сведение математической задачи к конечномерной. Это чаще всего достигается дискретизацией исходной задачи, т.е. переходом от функции непрерывного аргумента к функциям дискретного аргумента.

Например, траектория центра тяжести баскетбольного мяча определяется не как непрерывная функция времени, а как дискретная функция координат от времени. Полученное решение дискретной задачи принимается за приближенное решение исходной математической задачи.

Этап 5. РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ.

Математикой разработано огромное количество алгоритмов решения тех или иных задач. Поэтому перед разработчиками математических моделей только стоит **проблема выбора того или иного из предлагаемых методов.**

Следующим шагом является процесс реализации выбранного способа в виде программы для ЭВМ или выбор существующей программы.

Техническое задание на разработку программного обеспечения оформляют в виде спецификации, включающей следующие разделы:

- 1. Название задачи** - дается краткое определение решаемой задачи, название программного комплекса, указывается система программирования для его реализации и требования к аппаратному обеспечению (компьютеру, внешним устройствам и т.д.).
- 2. Описание** - подробно излагается математическая постановка задачи, описываются применяемая математическая модель для задач вычислительного характера, метод обработки входных данных для задач не вычислительного (логического) характера и т.д.
- 3. Управление режимами работы программы** - формируются основные требования к способу взаимодействия пользователя с программой – описывается интерфейс «пользователь-компьютер».
- 4. Входные данные** - описываются входные данные, указываются пределы, в которых они могут изменяться, значения, которые они не могут принимать, и т.д.

5. Выходные данные - описываются выходные данные, указывается, в каком виде они должны быть представлены (в числовом, графическом или текстовом), приводятся сведения о точности и объеме выходных данных, способах их сохранения и т.д.

6. Обработка ошибок - перечисляются возможные ошибки пользователя при работе с программой (например, ошибки при вводе входных данных). Указываются способы диагностики (под диагностикой понимается, обнаружение ошибок при работе программного комплекса) и защиты от этих ошибок, а также возможная реакция пользователя при совершении им ошибочных действий и реакция программного комплекса (компьютера) на эти действия.

7. Тестовые задачи - приводятся один или несколько тестовых примеров, на которых в простейших случаях проводится отладка и тестирование программного комплекса.

Этап 6. ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ

Под адекватностью математической модели понимается степень соответствия результатов моделирования – экспериментальным данным или тестовой задаче.

Проверка адекватности модели преследует две цели:

- убедиться в справедливости принятых гипотез;
- установить, что точность полученных результатов соответствует точности, оговоренной в техническом задании.

Проверка выполняется путем сравнения с **имеющимися экспериментальными данными** о реальном объекте или с результатами других, **созданных ранее и хорошо себя зарекомендовавших моделей**. В первом случае говорят о проверке путем сравнения с **экспериментом**, во втором - о сравнении с результатами решения **тестовой задачи**.

В моделях, предназначенных для выполнения оценочных расчетов, удовлетворительной считается точность **10-15%**. В моделях, используемых в управляющих системах, требуемая точность может быть **1-2%** и даже более.

Различают **качественное и количественное совпадение результатов сравнения**. При качественном сравнении требуется лишь **совпадение некоторых характерных особенностей** исследуемых параметров (например, наличие экстремальных точек, возрастание или убывание параметра). При количественном сравнении большое значение следует придавать точности исходных данных для моделирования и соответствующих им значений сравниваемых параметров.

Этап 6. ПРОВЕРКА АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ

Неадекватность результатов моделирования возможна, по крайней мере, по трем причинам:

- 1) значения задаваемых параметров модели не соответствуют допустимой области этих параметров, определяемой принятой системой гипотез;
- 2) принятая система гипотез верна, но константы и параметры в использованных определяющих соотношениях установлены не точно;
- 3) не верна исходная совокупность гипотез.

Все три случая требуют дополнительного исследования как моделируемого объекта (с целью накопления новой дополнительной информации о его поведении), так и исследования самой модели (с целью уточнения границ ее применимости).

При возникновении проблем, связанных с адекватностью модели, её корректировку требуется начинать с последовательного анализа всех возможных причин, приведших к расхождению результатов моделирования и результатов эксперимента.

Особенно опасной является ситуация, в которой при решении реальной задачи с использованием не проверенной должным образом модели получаются правдоподобные результаты. Для других условий модель может дать качественно неверные результаты.

В модели о баскетбольном мяче учтём сопротивление воздуха

Для достижения дальности броска **6,227м**, начальная скорость должна быть **6,575 м/с**, что на **2,1%** больше, чем для модели без учета сопротивления воздуха.

$$F_{\text{сопр}} = -k \cdot v^2$$