

Типы моделей

По способу реализации можно выделить два основных типа математических моделей, использующихся в естественных науках: аналитические (эмпирические) и имитационные. Если рассматривать наиболее простую математическую модель, в которой присутствует только одна переменная X , которая зависит от одного фактора t , то ее можно представить в следующем виде:

$X(t) = F(X_0, t)$, где F - некая функция, отражающая зависимость X от t .

При рассмотрении моделей, включающих более одной переменной, F является разрешающим оператором совокупности математических соотношений между переменными и факторами. В случае, когда для F найдено точное аналитическое выражение, позволяющее для любого начального условия X_0 определить значение переменной X для любого t , модель принято считать аналитической (Федоров, Гильманов, 1980).

Аналитические модели

В аналитических моделях действительные механизмы функционирования объектов моделирования и их компонентов либо совсем не рассматриваются, либо используются очень упрощенные представления о них. Подобные модели могут использоваться при рассмотрении отдельных процессов или простых биосистем, подверженных воздействию ограниченного числа факторов. Традиционно аналитические модели применяются для формализации представлений о механизмах изучаемых процессов и носят ярко выраженный объяснительный характер. Модели этого типа обладают многими удобными с математической точки зрения свойствами, облегчающими их применение для изучения моделируемых объектов. В частности, они позволяют использовать весьма эффективные аналитические методы качественной теории дифференциальных уравнений, теории колебаний и теории бифуркаций. Подробное изложение общих принципов описания поведения биологических систем с помощью аналитических моделей, приемы и примеры качественного исследования различных биологических процессов можно найти во многих учебниках (например: Смит, 1976; Романовский и др., 1984; Рубин, 1999; Ризниченко, 2002).

При моделировании сложных систем нахождение аналитического выражения для разрешающего оператора F часто оказывается затруднительным или в принципе невозможным. В случае, если соотношения между переменными и факторами не противоречат друг другу и их достаточно для нахождения решения, составляют алгоритм численного решения уравнения или системы уравнений, формирующих модель, на компьютере. Оператор F реализуется в виде программы, с помощью которой по входным и начальным данным рассчитываются значения переменных модели. Такие модели называются имитационными, а иногда, по способу их реализации, и не совсем точно, компьютерными.

Имитационные модели

Четкого общепринятого определения имитационных моделей пока не существует. В целом имитационные модели характеризуются следующими чертами:

- в основе лежит камерный (блочный) принцип, топологическая структура модели может быть отражена потоковой диаграммой;
- аналитически модели описываются системами дифференциальных или конечно-разностных уравнений;
- потоки между блоками формализованы уравнениями различной сложности, отражающими действительные механизмы процессов и позволяющие учитывать влияние как внешних, так и внутренних по отношению к системе факторов на протекание процесса.

Таким образом, основа имитационного моделирования заключается в упрощенном графическом описании структуры объекта в виде потоковой диаграммы, написании системы уравнений, отражающих функционирование объекта с позиции такого упрощения, идентификации уравнений функций переноса и параметров, входящих в них, и реализации модели на компьютере, включая отладку программы и проверку работы модели. Все это предваряется и сопровождается сбором информации об объекте, необходимой для построения и проверки модели, и анализом ее поведения. Имитационные модели позволяют наиболее полно использовать всю имеющуюся информацию об объекте моделирования. Признано также, что имитационное моделирование является одним из самых эффективных методов количественного прогноза поведения сложных систем. Традиционным способом реализации имитационных моделей является написание программ на различных алгоритмических языках, которые затем вводятся в компьютер для дальнейшего просчета. Такой способ реализации позволяет изменять ход вычислений в зависимости от промежуточного результата, что делает возможным учет влияния факторов самого различного характера, в том числе и модифицирующего, на объект моделирования и изменение в процессе вычислений его ответа на воздействие этих факторов. Это еще одна очень важная отличительная черта имитационного моделирования.

Имитационное моделирование в настоящее время является наиболее используемым в экологии типом математических моделей. Это обусловлено спецификой объектов исследования. Поясним на примере. Типичные объекты исследования в экологии – экосистемы характеризуются высокой гетерогенностью, состоят из множества компонентов, связанных между собой и с окружающей средой взаимоотношениями различного характера (энергетические, вещественные и информационные). Изменения в одном из компонентов экосистемы как правило влекут за собой изменения в других. Экологические процессы динамичны в пространстве и времени, им присуща определенная неоднозначность поведения при одних и тех же условиях. Функционирование экосистем характеризуется явлениями запаздывания, кумулятивными эффектами, порогами, сложными нелинейными зависимостями и вероятностным характером процессов. Имитационное моделирование наиболее отвечает таким особенностям экосистем, как объекта моделирования, по принципам построения и реализации моделей.

Создание имитационных моделей целесообразно при наличии достаточных знаний об объекте моделирования и особенно эффективно при решении локализованных экологических проблем. Модели данного типа успешно используются на практике, например, для выбора оптимальной стратегии управления природными процессами при разных режимах хозяйственной деятельности. Ограниченная “глубина” прогноза имитационной модели искупается его точностью на временных интервалах, не сопровождающихся значительным качественным изменением экосистемы, в том случае, когда модель достаточно надежна.

Схема построения математических моделей

Применение математического моделирования в естествознании характеризуется рядом этапов, которые в той или иной степени сопутствуют друг другу. В самом общем виде схему построения математических моделей можно представить следующим образом:

- определение задачи и сбор исходных данных;
- алгоритмизация;
- реализация и проверка модели;
- численные эксперименты на модели.

Более подробно этот процесс рассматривается у Федорова, Гильманова (1980) и включает в себя пункты, которые можно кратко описать следующим образом:

Постановка задачи - выделение конечного числа свойств и процессов, которые наиболее существенны для решения исследуемой проблемы.

Концептуализация – обобщение и анализ информации, имеющей отношение к исследуемому объекту, оценка полноты этой информации, создание концептуальной схемы объекта.

Спецификация – определение входных переменных и переменных состояния будущей модели.

Идентификация – определение математических соотношений между вышеуказанными переменными.

Наблюдения и эксперименты – сбор недостающей информации.

Реализация модели – построение разрешающего оператора модели в аналитическом виде или в виде компьютерной программы.

Проверка модели – сравнение результатов моделирования с уже имеющейся информацией, полученной в ходе предварительных исследований.

Исследование модели – изучение свойств модели, ее устойчивости к варьированию начальных условий, поведения в исследуемом диапазоне факторов влияния и т.д.

Для иллюстрации вышесказанного рассмотрим порядок построения простейшей модели на примере исследования гипотетической ситуации техногенного загрязнения растительности и почвы при одноразовом поступлении загрязнителя из атмосферы.

Постановка задачи: Изучить закономерности поведения загрязнителя в системе почва – растения и его выведение из изучаемой системы.

Концептуализация: Имеется система из двух компонентов – почвы и растительности. Эти компоненты связаны между собой противоположнонаправленными потоками. Загрязнитель поступает из атмосферы как в почву, так и на растительность, и выводится из почвы в подстилающие породы. Предполагается, что внешних факторов, влияющих на эти процессы, нет. Концептуальная схема функционирования объекта отображается в виде так называемой потоковой диаграммы (рис. 5.1). Интересующие нас величины, отражающие количественные аспекты функционирования объекта (в нашем случае – это количество загрязнителя в растительности или почве), называются переменными состояния. Переменные состояния на потоковых диаграммах обозначены прямоугольниками, потоки (функции переноса) – сплошными стрелками, внешняя переменная – эллипсом.

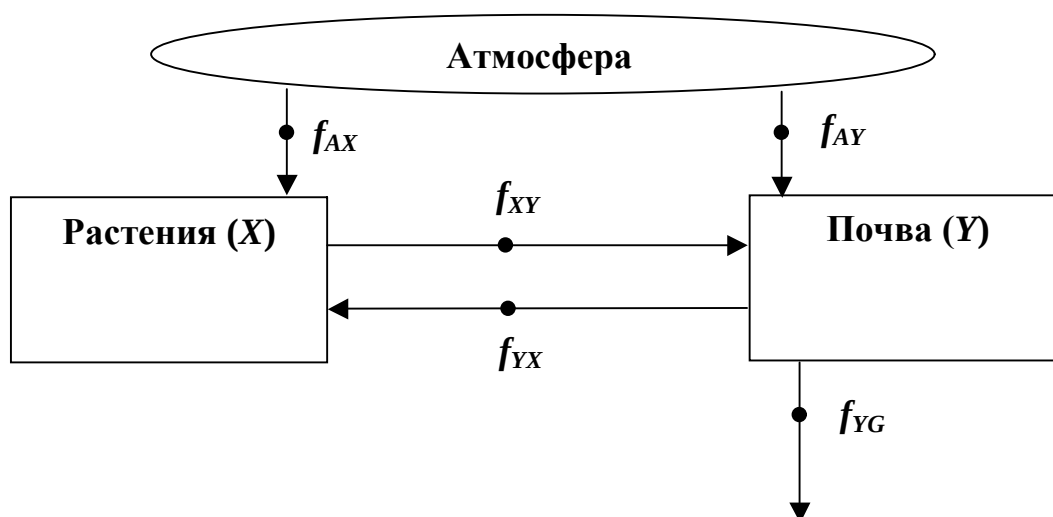


Рис. 5.1 Потоковая диаграмма динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения

Спецификация: В состав модели включены две переменных состояния – содержание загрязнителя в растениях (X) и в почве (Y). Размерность переменных – граммы на квадратный метр (г/м^2). Шаг, с которым будет рассматриваться динамика содержания

загрязнителя – 1 год.

Идентификация: Модель представляет собой систему из двух конечно-разностных уравнений:

$$\Delta X = f_{AX} + f_{YX} - f_{XY}$$

$$\Delta Y = f_{AY} + f_{XY} - f_{YG}$$

В левых частях уравнений – изменение величины соответствующей переменной состояния за 1 год, в правых – сумма потоков (функций переноса), обуславливающих это изменение (г/м²/год).

В данном примере присутствуют следующие функции переноса:

f_{AX} и f_{AY} – поступление загрязнителя из атмосферы на растительность и в почву

f_{XY} – переход загрязнителя из растительности в почву (с опадом, в процессе вымывания осадками и т.д.)

f_{YX} – корневое поглощение загрязнителя растениями из почвы

f_{YG} – выход загрязнителя за пределы почвенного профиля (лессиваж, диффузия, конвективный перенос и т.д.)

Каждая функция переноса представляет собой уравнение той или иной формы, отражающее интенсивность отдельно рассматриваемого процесса. Например, если предположить, что за год из растительности в почву переходит постоянная доля загрязнителя, содержащегося в растительности, то функция f_{XY} выглядит следующим образом: $f_{XY} = a_1 \cdot X$, где a_1 – параметр уравнения, константа, показывающая какая доля загрязнения растительного покрова поступает в почву за год. В простейшем случае все функции переноса могут быть представлены в таком виде, как линейные функции.

Реализация моделей

Имитационные модели обычно реализуются на компьютере в виде программ. Развитие вычислительных средств создало предпосылки к прямому участию ученых-естественников как в создании, так и в реализации моделей. Удобный интерфейс и большие возможности различных сред для структурного и объектно-ориентированного программирования сделали более привлекательным применение имитационного моделирования для ученых, не являющихся профессиональными программистами. Для того, чтобы облегчить процесс создания моделей были разработаны языки моделирования (например DINAMO, CSSL). Эти языки представляют собой расширения универсальных языков программирования с помощью операторов, технические детали работы которых программисту знать нет необходимости.

Существуют специализированные компьютерные системы предназначенные для создания имитационных моделей различных объектов. Примером такого программного продукта может служить пакет GPSS World, разработанный компанией Minuteman Software (США). Общелевая система имитационного моделирования GPSS World, – это мощная среда компьютерного моделирования общего назначения, разработанная для профессионалов в области моделирования. Следует однако отметить, что широкие возможности этой системы отягощены необходимостью изучения достаточно сложного внутреннего языка.

В то же время существуют программы, которые позволяют создавать имитационные модели, не вникая в детали программирования. В качестве примера можно привести программу SCoP (Simulation Control Program) предназначенную для моделирования биологических систем. Составителям моделей в диалоговом режиме предлагается описать систему алгебраическими и дифференциальными уравнениями и указать последовательность вызова подпрограмм. Затем созданный текст программы компилируется и компонуется с библиотекой SCoP и запускается на счет.

Более наглядный, на наш взгляд, способ реализации моделей предоставляет пакет **SB ModelMaker**. Пользователю предлагается создать потоковую диаграмму прямо на экране монитора (кнопки меню “Compart” и ”Flow”), как это показано на рис. 3, где представлена

модель из двух компонентов C1 и C2, связанных одним потоком F1. Затем необходимо указать для каждого потока уравнение, описывающее этот поток (курсор устанавливается на стрелку потока, при нажатии кнопки мыши открывается окно “Flow Defenition”). Далее вводятся численные значения параметров, входящих в эти уравнения (кнопка меню “Param”). Теперь остается только выбрать способ выдачи результата счета (цифровой (кнопка меню “Table”) и (или) графический (кнопка меню “Graph”)) и запустить модель на счет (кнопка меню команда “Run”). Отметим, что данный пакет, как и другие, ему подобные, позволяет строить только простые модели и ориентирован на тех исследователей, которые эпизодически занимаются созданием несложных имитационных моделей обобщающего или демонстрационного характера.

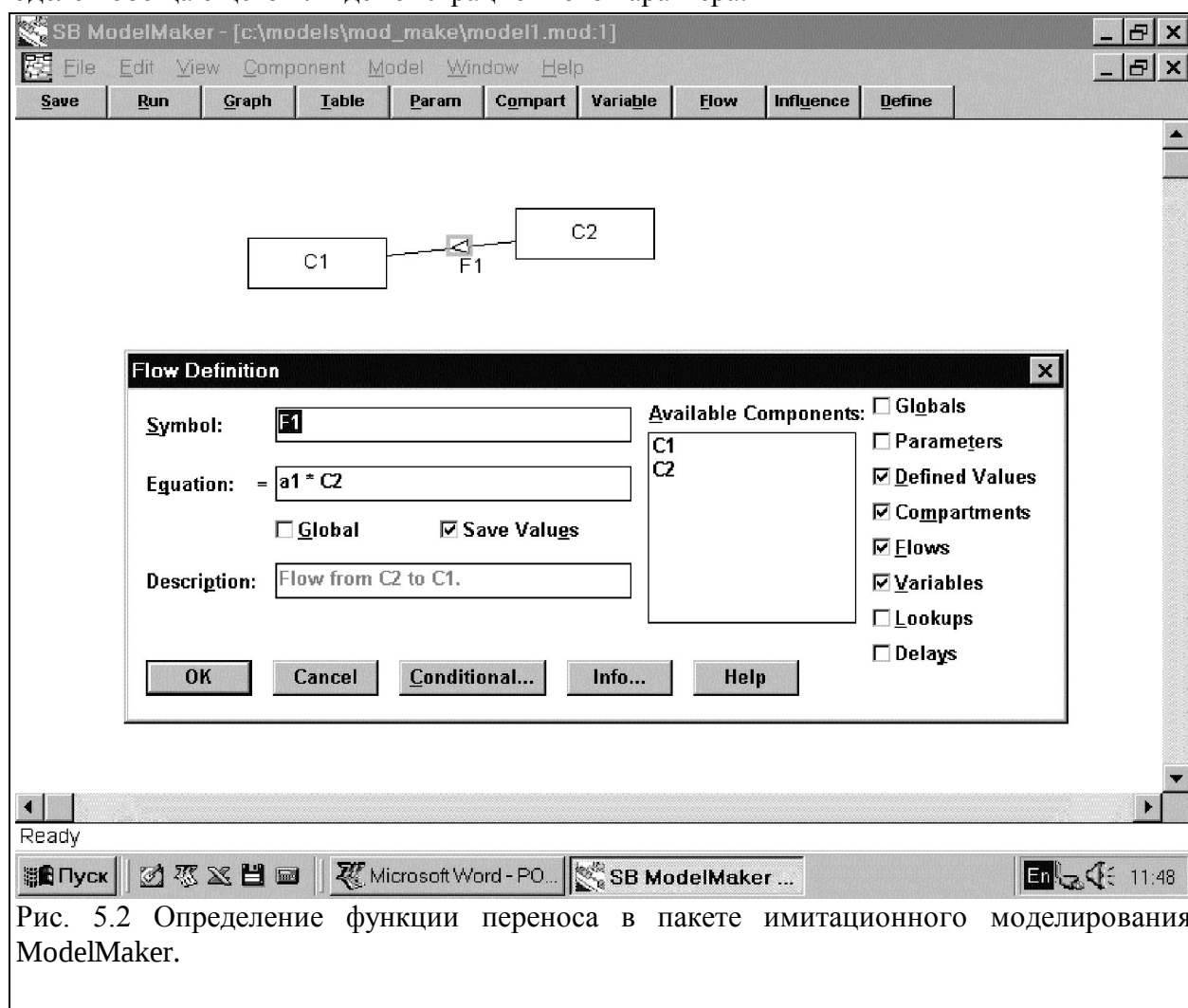
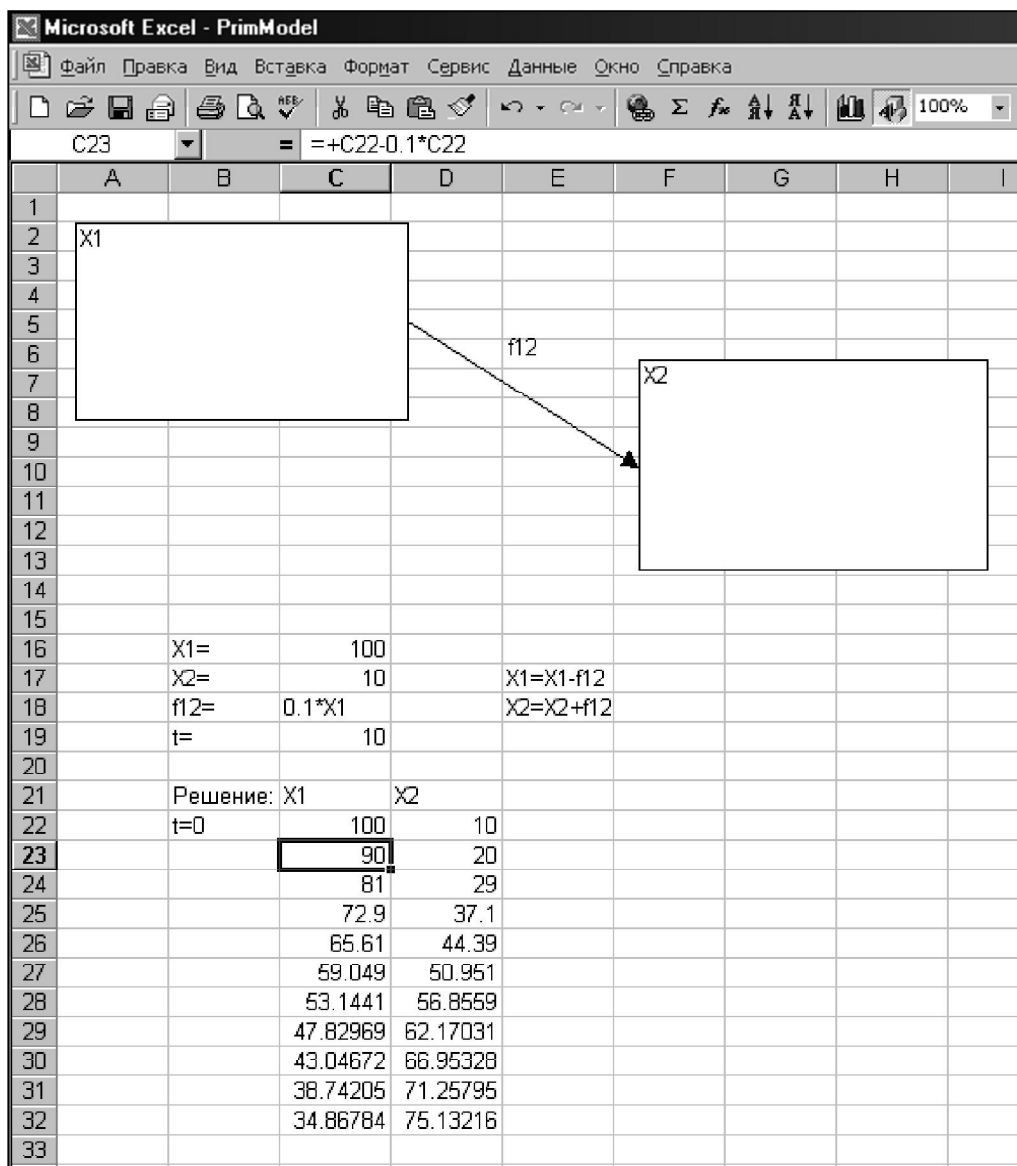


Рис. 5.2 Определение функции переноса в пакете имитационного моделирования ModelMaker.

В целом, использование таких пакетов для создания сложных, многокомпонентных моделей, по нашему мнению, неэффективно, поскольку потребует от пользователя таких усилий по освоению данных программ, которые сопоставимы с обучением программированию на алгоритмическом языке. Возможности же любой из этих программ как правило ограничены, скорость расчетов низкая, совместимость с другими программными средствами отсутствует, т.е. построенные с их помощью модели не могут интегрироваться в более крупные модельные комплексы. Применение таких систем может быть оправдано только в случае наработки достаточного числа специализированных модулей, которые были бы пригодны для использования в конкретных имитационных моделях.

Некоторые исследователи, достаточно хорошо освоившие какие-либо электронные таблицы (чаще всего это **Excel**) и умеющие писать макросы или программировать на встроенном языке, используют эти таблицы для создания моделей. Недостатки здесь те же, о которых говорилось выше, а быстроедействие таких моделей очень низкое.

Рис. 5.3 Пример реализации простейшей модели в электронных таблицах Excel



Более традиционным и более эффективным на наш взгляд способом реализации моделей является создание программ на различных алгоритмических языках. Для этого существует большой выбор программных пакетов, в том числе и для персональных компьютеров, например таких, как QuickBasic, Turbo C++, Visual Basic или подобные им. Эти системы программирования включают как минимум экранный текстовый редактор программ, управляющую среду с многооконными меню, отладчик, обучающую систему и встроенный компилятор, что создает все необходимые условия для реализации моделей практически любой сложности.

Для начинающих рекомендуем систему программирования QuickBasic 4.5 фирмы Microsoft или даже сначала ее упрощенный вариант **QBasic** (Рис 5.5), в котором нельзя создавать подпрограммы, но есть полностью руссифицированная версия, даже помощь на русском языке.

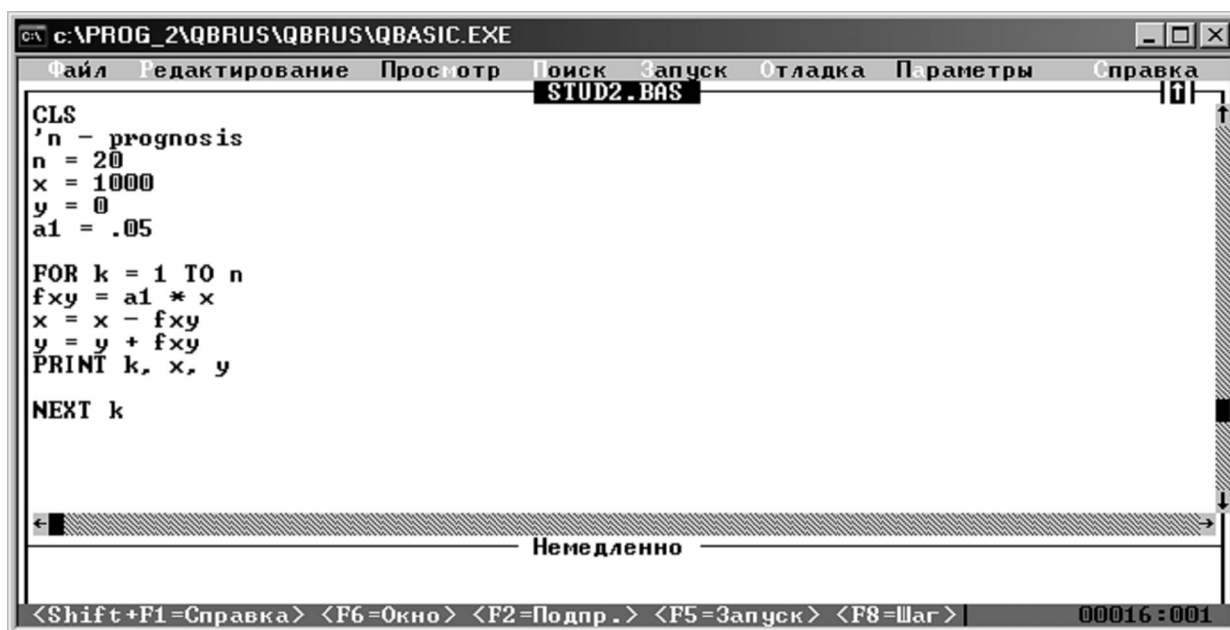


Рис. 5.4 Среда программирования Qbasic.

Это объясняется тем, что алгоритмический язык BASIC является одним из самых простых и доступных для широкого круга пользователей персональных компьютеров и в тоже время развитым структурным и процедурным языком программирования, достаточно высокого уровня для того, чтобы заинтересовать любого пользователя, тем более занимающегося имитационным моделированием, для которого необходима, в первую очередь возможность проводить математические расчеты и без проволочек вносить изменения в программу и получать результаты расчетов. Входящая в комплект QuickBASIC 4.5 обучающая программа позволяет быстро освоить систему и перейти к созданию программ. Интегрированная среда QuickBASIC 4.5 включает хороший и простой редактор, встроенную контекстную помощь, отладчик, средства создания исполняемых программ и стандартных библиотек — все это является удобным инструментом для быстрой реализации имитационных моделей. QuickBASIC успешно работает как в среде MS DOS, так и в среде Windows, однако скорость расчетов под MS DOS (или в режиме эмуляции MS DOS) в 1,5 - 2 раза выше.

В MS DOS результаты расчетов для дальнейшей с ними работы можно сразу выводить в текстовый файл с расширением .dat или, выводя их с помощью оператора PRINT для предварительного просмотра на экран, затем сохранять в виде текстового файла с помощью программы sniprer.exe или аналогичной, копирующей текстовую информацию с экрана.

При запуске QuickBASIC под Windows результаты расчетов можно воспользоваться одним из способов снятия «снимка экрана», например сохранить содержимое экрана в буфере в виде графической копии всего экрана (Print Screen) или копии отдельного окна (Alt + Print Screen). Это достаточно удобно, если результаты расчетов помещаются на один экран. Затем из буфера информацию можно сохранить в виде рисунка, например в Paint Brush или вставить в документ какого-либо офисного приложения (например Word или Power Point). Также, как и при работе в MS DOS, результаты расчетов можно сохранить в виде текстового файла с расширением .dat, который в последствии загружается в те же офисные приложения Word или Excel для дальнейшей обработки.

Результатом дальнейшего развития систем программирования, основанных на Бэйсике, является Visual BASIC, частично совместимый с QuickBASIC и предназначенный для создания программ, работающих в среде Windows. Это более ресурсоемкая среда программирования. Visual BASIC представляет практически неограниченные возможности по организации интерфейса, в нашем случае — диалога с

моделью и просмотра и сохранения результатов расчетов. Модельные расчеты на современных процессорах выполняются в нем быстрее, но он требует гораздо больших усилий от начинающего программиста для организации ввода и вывода информации. Освоение Visual BASIC может быть следующим этапом по мере развития навыков в программировании.

Приведенная ранее простейший модель была построена на бумаге, теперь остается реализовать ее в виде компьютерной программы, проверить по реальным данным и исследовать. На рис. 5.5 представлена вариант реализации этой модели в системе QuickBasic.

Рис. 5.5 Текст программы двухкомпонентной модели динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения для сценария одноразового выпадения.

```
'Prog1

CLS 'Clean screen (очистить экран)

n = 10 'prognosis (прогноз)

x = 0 'plants (растения)
y = 0 'soil (почва)

'Parameters (параметры)
a1 = .5 : a2 = .05: a3 = .01 : a4 = 100 : a5 = 200

FOR k = 1 TO n      'year cycle (цикл по годам)

  'Transfer functions (функции переноса)
  fax = 0 : fay = 0 : fyx = a2 * y
  fxy = a1 * x : fyg = a3 * y

  IF k = 1 THEN
    fax = a4
    fay = a5
  END IF

  'State variables (переменные состояния)
  x = x + fax + fyx - fxy
  y = y + fay + fxy - fyx - fyg

  PRINT x, y ' выдача результатов на экран

NEXT k

END
```

Вопросы для самоконтроля

- 1) Назовите основные типы математических моделей.
- 2) В чем различие между аналитическими и имитационными моделями?
- 3) В чем заключается основа имитационного моделирования?
- 4) В каком случае применяются имитационное моделирование?
- 5) Какие пункты включает в себя построение имитационной модели?
- 6) Что такое потоковая диаграмма? Как обозначаются на ней переменные и потоки?
- 7) Что такое функция переноса и параметр уравнения?
- 8) Что находится в правой и левой частях конечностно-разностного уравнения?
- 9) Назовите основные средства реализации имитационных моделей.

10) Какие свойства экосистем создают предпосылки к применению именно имитационного моделирования?

Упражнения

Модели предлагается реализовать в среде программирования Qbasic, в пакете моделирования ModelMaker или в электронных таблицах Excel (с учетом знаний обучающихся и наличия необходимых программных средств).

1. Предлагается построить имитационную модель миграции радионуклида в системе растения – почва, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 5.6

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 0.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид : $f = a_i * X$ или $f = a_i * Y_i$
- Прогноз производится на 20 лет с шагом 1 год
- Загрязнение происходит в первый год (на почву годы выпадает 500 условных единиц, на растения – 300)
- Все параметры a_i равны 0,01
- Радиоактивный распад не учитывается

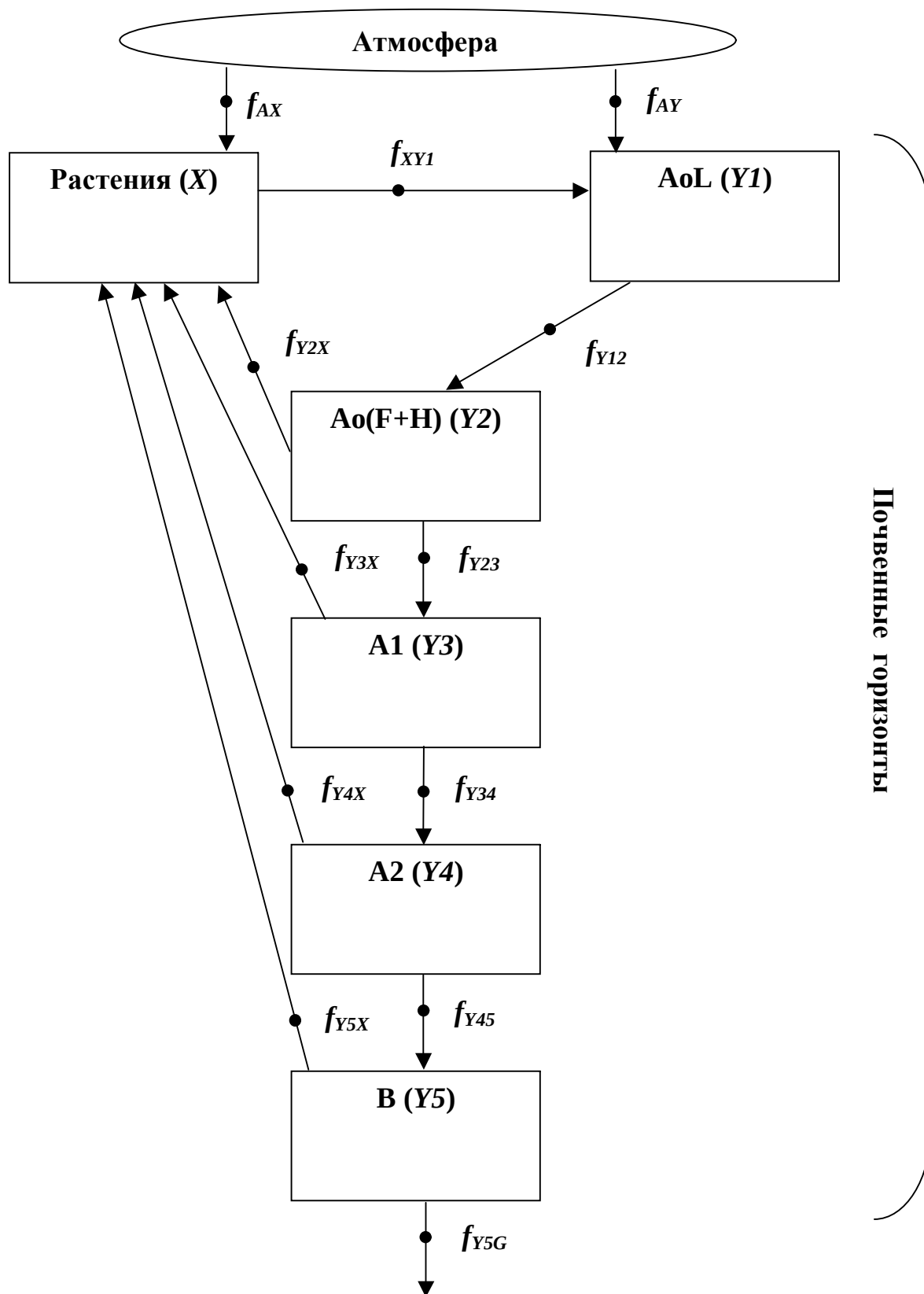


Рис. 5.6 Потоквая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (для дерново-подзолистой почвы, поступление в почву из корней не учитывается)

2. Предлагается построить имитационную модель миграции техногенного загрязнителя в системе растения – почва, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 5.7.

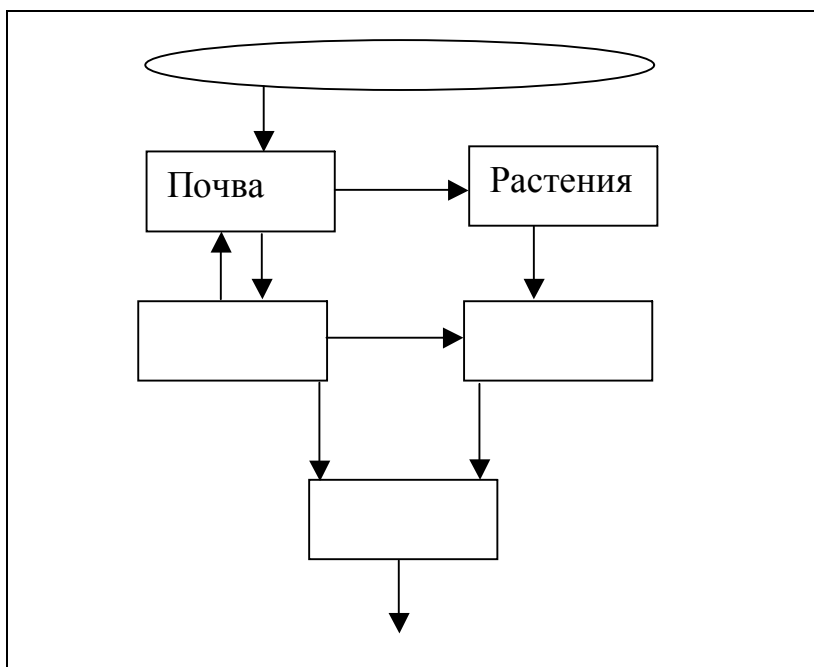


Рис. 5.7 Потоковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (обучающиеся должны сами присвоить имена переменным и функциям переноса)

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 5.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид : $f = a_i * X$ или $f = a_i * Y_i$
- Прогноз производится на 25 лет с шагом 1 год
- Загрязнение происходит в первый и десятый годы (в эти годы выпадает 300 условных единиц)
- Все параметры a_i равны 0,015

3. Предлагается построить имитационную модель миграции техногенного загрязнителя в системе растения – почва, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 5.8.

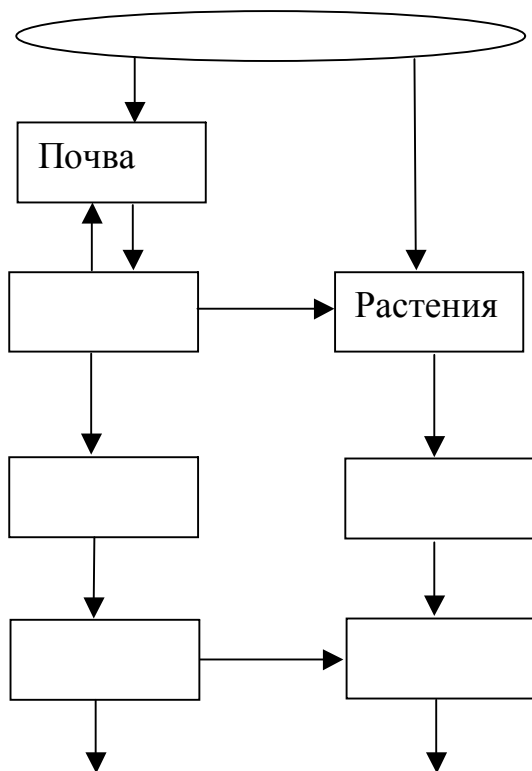


Рис. 5.8 Потоковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (обучающиеся должны сами присвоить имена переменным и функциям переноса)

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 10.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид : $f = a_i * X$ или $f = a_i * Y_i$
- Прогноз производится на 15 лет с шагом 1 год
- Загрязнение происходит в первый и пятый годы (на почву в эти годы выпадает 200 условных единиц, на растения – 10)
- Все параметры a_i равны 0,02

Литература

1. Мамихин С.В. Динамика углерода органического вещества и радионуклидов в наземных экосистемах (имитационное моделирование и применение информационных технологий). М., Изд-во Моск. ун-та, 2003, 172 с.
(http://ecoradmod.narod.ru/rus/publication/mam02_book.pdf)
2. Мамихин С.В., Кулигина Е.А., Хомяков Д.М. Компьютеризация исследований в экологии, почвоведении и агрохимии .М.: Издательство Московского университета, 2005, 100 с.
3. Ризниченко Г.Ю. Лекции по математическим моделям в биологии. Часть 1. Ижевск, НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2002, 236 с.
4. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. М., Наука, 1984, 304 с.
5. Рубин А.Б. Биофизика. Т.1 Теоретическая биофизика , М., Книжный дом "Университет", 1999, 464 с.
6. Смит Дж.М. Модели в экологии. М., Мир, 1976, 184 с.
7. Федоров В.Д., Гильманов Т.Г. Экология, М., МГУ, 1980, 464 с.