

«Утверждаю»  
директор ГЕОХИ РАН  
академик

Э.М.Галимов

«\_\_»\_\_\_\_\_2003 года

# **Основы математического моделирования в научных исследованиях**

*Составители:*  
*чен-корр. РАН Грибов Л.А.*  
*д.ф.-м.н. Дементьев В.А.*

## **1. Моделирование как метод познания реальной действительности**

Принцип дополнительности Бора в применении к процессу познания природных процессов. Соотношение между истинностью и ясностью научной теории. Модель как реализация необходимого компромисса между степенью истинности и ясности в описании изучаемого природного процесса. Роль моделей в фундаментальных и прикладных науках.

Естествознание как единая система. Иерархия разделов естествознания. Модель как агент передачи знаний между различными разделами естествознания. Упрощение и усложнение модели при её переносе из одного раздела естествознания в другой. Примеры изменения содержания модели молекулы при её переносе из физики в химию и обратно.

## **2. Прямые и обратные задачи научной теории**

Прямая задача - прогнозирование протекания природных процессов. Прямая задача как одна из основных задач прикладной науки. Средства решения прямых задач – экспериментирование, аналогии, теории, физические модели, математические модели. Возможность автоматизации получения решений прямых задач с помощью вычислительной техники и программирования.

Свойства решений прямой задачи. Степень объективности решения. Однозначность решения. Точность решения. Источники погрешностей решения прямых задач. Принципиальная невозможность получения точных решений широкого класса задач прогнозирования в рамках одной теории и одного класса моделей.

Обратная задача – параметризация модели природного явления. Ограниченность первых принципов как средства прогнозирования. Необходимость построения полуэмпирических теорий природных явлений. Эксперимент и попытка воспроизведения его результатов с помощью моделирования и прогнозирования – единственный источник параметризации моделей прикладной науки. Многократное решение прямой задачи и варьирование параметров модели – основной способ решения обратной задачи.

Свойства решений обратной задачи. Неоднозначность решения. Неточность решения прямых задач теории как причина неоднозначности решения обратных задач. Субъективизм в выборе решения обратной задачи как необходимый элемент прикладной науки. Перенос результатов решения обратной задачи на более широкий класс прямых задач как основа накопления знаний о природных явлениях (по В.И. Вернадскому – создание научного аппарата человечества). Степень переносимости результатов решения обратной задачи как количественный критерий степени субъективизма развиваемой прикладной теории. Степень субъективизма теории и широта области её применимости – пара, подчиняющаяся принципу дополнительности Бора.

### **3. Методы решения прямых задач моделирования**

Составление дифференциального уравнения с целью математического описания основных закономерностей, управляющих ходом исследуемого природного процесса. Условия, при которых язык дифференциальных уравнений адекватен природным процессам. Роль начальных и граничных условий.

Аналитические методы решения дифференциальных уравнений, их ограниченность при решении прикладных задач. Способы оценки точности прогноза. Графическое представление результатов решения дифференциальных уравнений. Возможности получения аналитических решений с помощью символьных процессоров, имеющихся в программных пакетах типа Matlab, Mapl, Mathematics. Графические программы для визуализации результатов решения дифференциальных уравнений.

Численные методы решения дифференциальных уравнений, их универсальность при решении прикладных задач. Способы оценки точности прогноза. Применение метода Монте-Карло для получения оценки точности прогноза.

Программные средства, применяемые для интегрирования дифференциальных уравнений. Написание программ на языке функций электронных таблиц Excel и построение графиков. Программирование решения дифференциальных уравнений на языке пакета Matlab с использованием готовых функций Ode23 и Ode45, реализующих процедуры Рунге-Кутты. Представление дифференциального уравнения высокого порядка в форме системы уравнений первого порядка. Графические программы для визуализации результатов численного решения дифференциальных уравнений. Модель Лоттки-Вольтерра как пример системы уравнений, описывающей периодические химические реакции.

Процессы, описываемые методами дискретной математики. Условия применимости этих методов в моделировании природных процессов. Итерационные методы прогнозирования поведения дискретных природных систем. Игра Жизнь как пример такой системы. Поиск стационарных состояний систем, в которых происходит рождение и гибель частиц, составляющих систему. Применение таких программ в химии, экологии, эпидемиологии.

## **4. Методы решения обратных задач моделирования**

Отсутствие стандартных методов решения обратных задач и необходимость разработки специальных программ для получения параметров природных процессов из экспериментальных данных. Применение известных математических методов и приёмов при программировании решения обратных задач. Метод Монте-Карло. Метод наименьших квадратов. Стандартные программы минимизации функционалов. Применение регуляризации при движении к минимуму функционала. Функция `fmins` из пакета `Matlab`, выполняющая поиск минимума функции многих переменных, и её использование для решения обратных задач.

## **5. Статистические методы моделирования природных процессов**

Поиск параметров случайных процессов, описываемых различными функциями распределения. Роль нормального распределения. Простейшие задачи многомерной статистики – поиск корреляций, ковариаций. Анализ ковариационной матрицы методом главных компонент. Понятие о факторном анализе. Применение методов многомерной математической статистики в аналитической химии.

Методы неклассической статистики, не опирающиеся на гипотезу о принадлежности экспериментальной выборки к нормальному распределению. Принципиальная необходимость применения компьютеров в реализации таких методов. Бутстрэп как пример метода неклассической статистики.

### **Рекомендуемая литература**

1. Потемкин В.Г. МАТЛАБ. Справочное пособие, Изд-во «Диалог МИФИ», 1998 г.
2. Потемкин В.Г. МАТЛАБ-5 для студентов. Изд-во «Диалог МИФИ», 1998 г.
3. Р. Олтман. Corel Draw 8. Полное руководство. М.: ЭНТРОП, 1999.
4. М.М. Ильина. Работа в Word 7 на примерах. М.: Восточная Книжная Компания, 1996 г.
5. М. Додж, К. Кината, К. Стинсон. The Cobb Group, Эффективная работа с Excel 7.0 для Windows 95, СПб: Питер, 1997.
6. В. Кун. Page Maker 5.0. СПб: ВНУ-Санкт-Петербург, 1994 г.
7. Р.Б. Олтман, Р. Олтман. Page Maker 6.0 для Windows 95. М.: Мир, 1997.

8. А.Г. Андреев, Е.Ю. Беззубов, М.М. Емельянов и др. Новые технологии Windows 2000. / Под общей ред. А.Н. Чекмарева. СПб: БХВ-Санкт-Петербург, 2000.
9. В.Г. Олифер, Н.А. Олифер. Компьютерная сеть. Принципы, технологии, протоколы. СПб.: Питер, 2001.