

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Р. В. СКИДАНОВ, Д. В. НЕСТЕРЕНКО

ВВЕДЕНИЕ В МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» в качестве учебного пособия для обучающихся по основной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика

САМАРА

Издательство Самарского университета

2024

УДК 519.6(075)+519.8(075)
ББК В19я7+В18я7
С429

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, проф. Д. Л. Головашкин,
д-р физ.-мат. наук, проф. С. В. Карпеев

Скиданов, Роман Васильевич

С429 **Введение в математическое моделирование:** учебное пособие / *Р. В. Скиданов, Д. В. Нестеренко.* – Самара: Издательство Самарского университета, 2024. – 120 с.: ил.

ISBN 978-5-7883-2037-3

Пособие включает описание основных понятий и методологии математического моделирования, излагаемых на примерах задач физики, экономики, социологии. Рассматриваются принципы построения математических моделей как на основе фундаментальных законов и вариационных принципов, так и на основе использования метода аналогий для объектов, не имеющих строгого описания функционирования.

Тема курса соответствует рабочей программе курса «Математическое моделирование». Предназначено для обучающихся по направлениям подготовки 01.03.02 Прикладная математика и информатика, 01.04.00 Математика.

Разработано на кафедре технической кибернетики.

УДК 519.6(075)+519.8(075)
ББК В19я7+В18я7

ISBN 978-5-7883-2037-3

© Самарский университет, 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	6
1. Основные способы построения математических моделей.....	12
1.1. Использование фундаментальных законов природы.....	12
1.2. Использование вариационных принципов.....	17
1.3. Применение аналогий при построении моделей.....	19
1.4. Нелинейность математических моделей.....	20
1.5. Этапы построения математической модели.....	22
2. Математические модели в механике.....	25
2.1. Классическая механика.....	26
2.2. Релятивистская механика.....	27
2.3. Квантовая механика.....	28
2.4. Квантовая теория поля.....	28
2.5. Основные способы построения математических моделей в механике.....	29
3. Универсальность математических моделей.....	34
3.1. Колебания жидкости в U-образном сосуде.....	34
3.2. Колебательный электрический контур.....	36
3.3. Малые колебания при взаимодействии двух биологических популяций.....	37
3.4. Простейшая модель изменения зарплаты и занятости.....	39
4. Простая иерархическая цепочка математических моделей (иерархический подход).....	41
4.1. Дополнительная внешняя постоянная сила.....	41
4.2. Дополнительная внешняя периодическая сила.....	41
4.3. Учет силы трения.....	42
4.4. Учет силы вязкого трения.....	43
4.5. Обратная иерархическая цепочка.....	46
5. Модели трудноформализуемых объектов.....	47
5.1. Динамика скопления амёб.....	47
5.2. Случайный марковский процесс.....	49

6. Модели соперничества.....	54
6.1. Взаимоотношения в системе “хищник - жертва”	54
6.2. Гонка вооружений между двумя странами	57
6.3. Боевые действия двух армий.....	58
7. Модели финансовых и экономических процессов.....	63
7.1. Модель рекламной кампании	63
7.2. Макромодель равновесия рыночной экономики (модель Кейнса).....	66
8. Моделирование систем массового обслуживания	73
8.1. Общие сведения.....	73
8.2. Математические модели систем массового обслуживания.....	74
8.3. Основные понятия технологии имитационного моделирования.....	76
8.4. Методы получения случайных величин на компьютере	78
8.5. Простейшая модель	83
9. Математическая эпидемиология: принципы моделирования ...	88
9.1. SIR модель.....	88
9.2. Упрощение SIR-модели	89
9.3. Усложнение SIR модели	90
10. Термодинамические модели.....	92
10.1. Виды моделей	92
10.2. Метод молекулярной динамики.....	92
10.3. Измерение макроскопических величин в моделях молекулярной динамики	94
10.4. Микрочанонический ансамбль.....	95
10.5. Модель Изинга.....	98
10.6. Канонический ансамбль.....	100
10.7. Алгоритм Метрополиса	100
11. Моделирование квантовых систем	103
11.1. Обзор квантовой теории	103
11.2. Стационарное уравнение Шредингера.....	105

11.3. Нестационарное уравнение Шредингера	106
11.4. Анализ квантовых систем с помощью метода случайных блужданий	107
12. Моделирование фазовых переходов.....	109
12.1. Геометрические фазовые переходы.....	109
12.2. Ренорм-группы.....	115
12.3. Метод Монте-Карло для ренорм-группы	117
Список литературы.....	119

ВВЕДЕНИЕ

Основой данного учебного пособия является курс лекций, читаемых для студентов четвертого курса специальности «Прикладная математика и информатика» и готовившихся, преимущественно, по книге академика А.А. Самарского [1]. В ходе преподавания материал перерабатывался и дополнялся. По сравнению с книгой существенно большее внимание уделено имитационному моделированию и специальным моделям: городское движение, распространение эпидемий, военные действия.

Сейчас невозможно представить себе современную науку без широкого применения математического моделирования. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его «образом» – математической моделью – и дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов.

Применительно к естественным, техническим и экономическим наукам принято различать следующие виды моделирования.

Концептуальное моделирование, при котором совокупность уже известных фактов или представлений относительно исследуемого объекта или системы истолковывается с помощью некоторых специальных знаков (символов), операций над ними или с помощью естественного или искусственного языков.

Физическое моделирование, при котором модель объекта представляется посредством объекта или процесса физической природы. Соответствие между процессами в объекте-оригинале и в модели устанавливается с помощью соотношений подобия, которые вытекают из схожести физических явлений.

Структурно-функциональное моделирование, при котором моделями являются схемы (блок-схемы), графики, чертежи, диаграммы, таблицы, рисунки, дополненные специальными правилами их объединения и преобразования.

Математическое (логико-математическое) моделирование, при котором моделирование осуществляется средствами математики и логики.

Имитационное моделирование, при котором логико-математическая модель исследуемого объекта представляет собой алгоритм функционирования объекта, реализованный в виде программного комплекса для компьютера.

Математическое моделирование – «третий метод» познания, конструирования, проектирования сочетает в себе многие достоинства, как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность безболезненно, относительно быстро и без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (компьютерные, симуляционные, имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют, опираясь на мощь современных вычислительных методов и технических инструментов информатики, подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента). Неудивительно, что методология математического моделирования бурно развивается, охватывая все новые сферы – от разработки технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов. Элементы математического моделирования использовались с самого начала появления точных наук, и не случайно, что некоторые методы вычислений носят имена таких корифеев науки, как Ньютон и Эйлер, а слово «алгоритм» происходит от имени средневекового арабского ученого Аль-Хорезми.

Бурное развитие этой методологии пришлось на конец 40-х – начало 50-х годов XX века, что было обусловлено двумя основными причинами. Первая из них – появление ЭВМ (компьютеров), хотя и скромных по нынешним меркам, но позволивших в то вре-

мя на несколько порядков ускорить рутинную вычислительную работу. Вторая – беспрецедентный социальный заказ – выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита.

Этот социальный заказ не мог быть реализован на основе только теоретического и экспериментального подходов из-за чрезвычайной сложности создаваемых систем. Математическое моделирование справилось с этой задачей: ядерные взрывы и полеты ракет и спутников были предварительно промоделированы на ЭВМ с помощью математических моделей и лишь затем претворены на практике. Этот успех во многом определил дальнейшее развитие методологии, без применения которой в настоящее время ни один крупномасштабный технологический, экологический или экономический проект теперь всерьез не рассматривается. Сейчас математическое моделирование вступает в третий принципиально важный этап своего развития, «встраиваясь» в структуры так называемого информационного общества. Впечатляющий прогресс средств переработки, передачи и хранения информации отвечает мировым тенденциям к усложнению и взаимному проникновению различных сфер человеческой деятельности. Без владения информационными «ресурсами» нельзя и думать о решении все более укрупняющихся и все более разнообразных проблем, стоящих перед мировым сообществом. Однако информация как таковая зачастую мало что дает для анализа и прогноза, для принятия решений и контроля за их исполнением. Нужны надежные способы переработки информационного «сырья» в готовый «продукт», т. е. в точное знание. История методологии математического моделирования убеждает: она может и должна быть интеллектуальным ядром информационных технологий, всего процесса информатизации общества. Технические, экологические, экономические и иные системы, изучаемые современной наукой, больше не поддаются исследованию (в нужной полноте и точности) обычными теоретическими методами. Прямой натурный

эксперимент над ними долог, дорог, часто либо опасен, либо попросту невозможен, так как многие из этих систем существуют в «единственном экземпляре». Цена ошибок и просчетов в обращении с ними недопустимо высока.

Поэтому математическое (шире – информационное) моделирование является неизбежной составляющей научно-технического прогресса. Сама постановка вопроса о математическом моделировании какого-либо объекта порождает четкий план действий. Его можно условно разбить на три этапа: модель – алгоритм – программа.

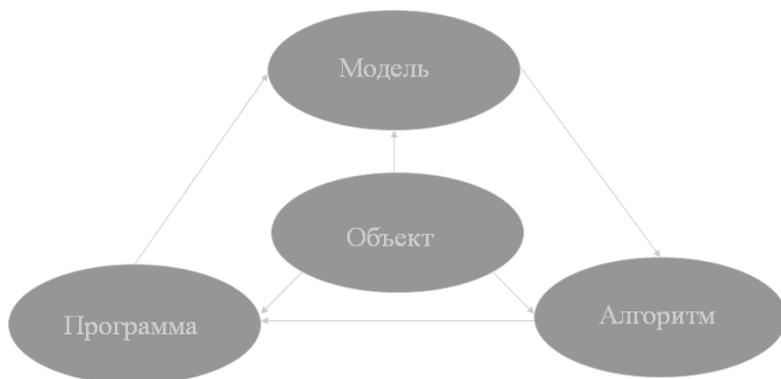


Рис. 1.1. Схема этапов при создании математической модели

На первом этапе выбирается (или строится) «эквивалент» объекта, отражающий в математической форме важнейшие его свойства – законы, которым он подчиняется, связи, присущие составляющим его частям, и т. д. Математическая модель (или ее фрагменты) исследуется теоретическими методами, что позволяет получить важные предварительные знания об объекте.

Второй этап – выбор (или разработка) алгоритма для реализации модели на компьютере. Модель представляется в форме, удобной для применения численных методов, определяется последовательность вычислительных и логических операций, которые

нужно произвести, чтобы найти искомые величины с заданной точностью. Вычислительные алгоритмы должны не исказить основные свойства модели и, следовательно, исходного объекта, быть экономичными и адаптирующимися к особенностям решаемых задач и используемых компьютеров.

На третьем этапе создаются программы, «переводящие» модель и алгоритм на доступный компьютеру язык. К ним также предъявляются требования экономичности и адаптивности. Их можно назвать «электронным» эквивалентом изучаемого объекта, уже пригодным для непосредственного испытания на «экспериментальной установке» – компьютере. Создав триаду «модель–алгоритм–программа», исследователь получает в руки универсальный, гибкий и недорогой инструмент, который вначале отлаживается, тестируется в «пробных» вычислительных экспериментах.

После того, как адекватность (достаточное соответствие) триады исходному объекту удостоверена, с моделью проводятся разнообразные и подробные «опыты», дающие все требуемые качественные и количественные свойства и характеристики объекта. Процесс моделирования сопровождается улучшением и уточнением по мере необходимости всех звеньев триады. Будучи методологией, математическое моделирование не подменяет собой математику, физику, биологию и другие научные дисциплины, не конкурирует с ними. Наоборот, трудно переоценить его синтезирующую роль. Создание и применение триады невозможно без опоры на самые разные методы и подходы – от качественного анализа нелинейных моделей до современных языков программирования. Оно дает новые дополнительные стимулы самым разным направлениям науки.

Рассматривая вопрос шире, напомним, что моделирование присутствует почти во всех видах творческой активности людей различных «специальностей» – исследователей и предпринимателей, политиков и военачальников. Привнесение в эти сферы си-

стематических принципов помогает создать правила над интуитивным умозрительным «моделированием», расширяя поле приложений рациональных методов. Конечно же, математическое моделирование плодотворно лишь при выполнении хорошо известных профессиональных требований: четкая формулировка основных понятий и предположений, апостериорный анализ адекватности используемых моделей, гарантированная точность вычислительных алгоритмов и т. д. Если же говорить о моделировании систем с участием «человеческого фактора», т.е. трудноформализуемых сущностей, то к этим требованиям необходимо добавить аккуратное разграничение математических и житейских терминов (звучащих одинаково, но имеющих разный смысл), осторожное применение уже готового математического аппарата к изучению явлений и процессов (предпочтителен путь «от задачи к методу», а не наоборот) и ряд других. Решая проблемы информационного общества, было бы наивно уповать только на мощь компьютеров и иных средств информатики. Постоянное совершенствование триады математического моделирования и ее внедрение в современные информационно-моделирующие системы – методологический императив. Лишь его выполнение дает возможность получать так нужную нам высокотехнологичную, конкурентоспособную и разнообразную материальную и интеллектуальную продукцию. Различным аспектам математического моделирования посвящено немало, хотя явно недостаточно, хороших и разных книг.

1. ОСНОВНЫЕ СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

С точки зрения математического моделирования как методологии теоретический подход является частным случаем математического моделирования, при котором модель позволяет получать решения без вычислительной техники.

Поэтому рассмотрим некоторые подходы к построению простейших математических моделей, иллюстрирующие применение фундаментальных законов природы, вариационных принципов, аналогий, иерархических цепочек. Несмотря на простоту, привлекаемый материал даст возможность начать обсуждение таких понятий, как адекватность моделей, их «оснащение», нелинейность, численная реализация и ряда других принципиальных вопросов математического моделирования.

1.1. Использование фундаментальных законов природы

Наиболее распространенный метод построения моделей состоит в применении фундаментальных законов природы к конкретной ситуации. Эти законы общепризнаны, многократно подтверждены опытом, служат основой множества научно-технических достижений. Поэтому их обоснованность не вызывает сомнений, что, помимо всего прочего, обеспечивает исследователю мощную психологическую поддержку. На первый план выдвигаются вопросы, связанные с тем, какой закон (законы) следует применять в данном случае и как это делать. Рассмотрим два примера использования фундаментальных законов сохранения.

А. Сохранение энергии. Этот закон известен почти двести лет и занимает, пожалуй, наиболее почетное место среди великих за-

конов природы. Полагаясь на него, эксперт по баллистике, желающий быстро определить скорость револьверной пули без возможностей специальной лаборатории, может воспользоваться относительно простым устройством типа маятника – груза, подвешенного на легком жестком и свободно вращающемся стержне (рис. 1.2).

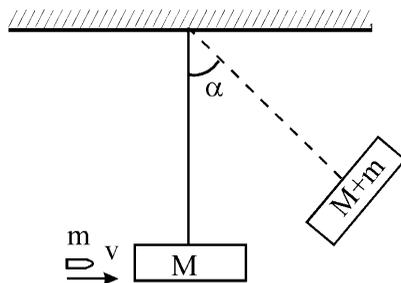


Рис. 1.2. Система пуля-груз

Пуля, застрявшая в грузе, сообщит системе «пуля–груз» свою кинетическую энергию, которая в момент наибольшего угла α отклонения стержня от вертикали полностью перейдет в потенциальную энергию системы. Эти трансформации описываются цепочкой равенств

$$\frac{mv^2}{2} = (M + m) \frac{V^2}{2} = (M + m) gl(1 - \cos \alpha).$$

Здесь $mv^2/2$ – кинетическая энергия пули массы m , имеющей скорость v , M – масса груза, V – скорость системы «пуля – груз» сразу после столкновения, g – ускорение свободного падения, l – длин; стержня, α – угол наибольшего отклонения. Искомая скорость определяется формулой

$$v = \sqrt{\frac{2(M + m) gl(1 - \cos \alpha)}{m}}, \quad (1.1)$$

которая будет вполне точной, если пренебрегаемые нами потери энергии на разогрев пули и груза, на преодоление сопротивления воздуха, разгон стержня и т.д. невелики. Это, на первый взгляд, разумное рассуждение на самом деле неверно. Процессы, происходящие при «слипании» пули и маятника, уже не являются чисто механическими. Поэтому примененный для вычисления величины V закон сохранения механической энергии несправедлив: сохраняется полная, а не механическая энергия системы. Он дает лишь верхнюю границу для оценки скорости пули (для правильного решения этой простой задачи надо воспользоваться также законом сохранения импульса. Вопрос о соответствии объекта и его модели – один из центральных в математическом моделировании, и в дальнейшем мы будем неоднократно к нему возвращаться.

Б. Сохранение материи. Именно этим соображением руководствуется школьник, решающий задачу о заполнении бассейна водой, втекающей и вытекающей из двух труб. Конечно же, область применения этого закона несравненно шире. Рассмотрим на примере использования этого закона переход от словесных формулировок к математическим.

Опишем типичную задачу, например, возникающую либо при хранении делящихся материалов, либо при их использовании в энергетике. Допустим, небольшое количество радиоактивного вещества (урана), представленное на рис. 1.3 областью I, окружено толстым слоем «обычного» материала (свинца), схематично представленным областью II.

Под термином «небольшой» подразумевается упрощающее обстоятельство, а именно то, что все продукты распада, не испытывая столкновений с атомами вещества, беспрепятственно покидают область I. Другими словами, длина свободного пробега продуктов распада λ_1 в первом веществе значительно больше характерных размеров самого материала L_1 , т. е. $\lambda_1 \gg L_1$. Характе-

ристика «толстый слой» означает, что в согласии с целями хранения продукты деления полностью поглощаются в области II. Это гарантируется при выполнении противоположного условия $\lambda_{II} \ll L_{II}$, где λ_{II} – длина пробега продуктов распада во втором веществе, L_{II} – его характерный размер. Итак, все, что вылетает из области I, поглощается в области II, и суммарная масса веществ в обеих областях со временем не меняется. Это и есть закон сохранения материи, примененный к данной ситуации. Если в начальный момент времени $t = 0$ массы веществ были равны $M_I(0)$ и $M_{II}(0)$, то в любой момент времени справедлив баланс

$$M_I(0) + M_{II}(0) = M_I(t) + M_{II}(t). \quad (1.2)$$

Одного уравнения (1.2), очевидно, недостаточно для определения текущих значений двух масс – $M_I(t)$ и $M_{II}(t)$. Для замыкания математической формулировки необходимо привлечь дополнительное соображение о характере распада. Оно гласит, что скорость распада (число атомов, распадающихся в единицу времени) пропорциональна общему числу атомов радиоактивного вещества. За небольшое время dt между моментами t и $t + dt$ всего распадется

$$N_I(t + dt) - N_I(t) = -\alpha N_I(t + \xi dt)$$

атомов, где $\alpha > 0$ – коэффициент, определяющий скорость распада, $0 < \xi < 1$. Здесь вторично использован закон сохранения вещества, но применительно не ко всему процессу, а к отрезку времени dt . В этом уравнении, описывающем баланс атомов, в правой части стоит знак минус (вещество убывает), а величина $N_I(t + \xi dt)$ соответствует некоторому среднему значению числа атомов за рассматриваемое время. Перепишем его в дифференциальной форме:

$$\frac{dN_I(t)}{dt} = -\alpha N_I(t).$$

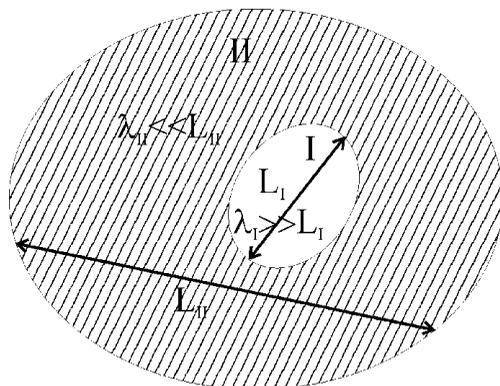


Рис. 1.3. Радиоактивное вещество в окружении свинца

Учитывая, что $M_I(t) = \mu_I N_I(t)$, где μ_I – атомный вес вещества I, получаем

$$\frac{dM_I(t)}{dt} = -\alpha M_I(t). \quad (1.3)$$

При самопроизвольной радиоактивности любой атом имеет некоторую независящую от состояния окружающего вещества вероятность распада. Поэтому, чем больше (меньше) самого радиоактивного вещества, тем больше (меньше) выделяется продуктов распада в единицу времени. Коэффициент пропорциональности $\alpha > 0$ (постоянное распада) определяется конкретным веществом. Уравнения (1.2) и (1.3) вместе с условиями $\lambda_I \gg L_I$, $\lambda_{II} \ll L_{II}$, а также величинами α , $M_I(0)$, $M_{II}(0)$ и составляют математическую модель рассматриваемого объекта. Интегрируя (1.3), получаем, что масса делящегося материала убывает по экспоненциальному закону

$$M_I(t) = M_I(0) \exp(-\alpha t),$$

и при $t \rightarrow \infty$ вещество в области I полностью исчезает. Так как в соответствии с законом сохранения (1.2) суммарная масса остается постоянной, то в области II количество вещества растет:

$$\begin{aligned}
 M_{II}(t) &= M_{II}(0) + M_I(0) - M_I(0)\exp(-at) = \\
 &= M_{II}(0) + M_I(0)[1 - \exp(-at)],
 \end{aligned}$$

и при $t \rightarrow \infty$ продукты распада полностью переходят из области I в область II.

1.2. Использование вариационных принципов

Вариационные принципы представляют собой весьма общие утверждения о рассматриваемом объекте. В вариационном принципе обычно формулируется некое условие, на основании которого из всех возможных вариантов движения или изменения объекта выбираются лишь удовлетворяющие ему.

Так, если взять за основу принцип Ферма: свет распространяется по траектории с наименьшим оптическим путем (минимальные затраты времени), то можно рассмотреть задачу о траектории света в процессе отражения (рис. 1.4).

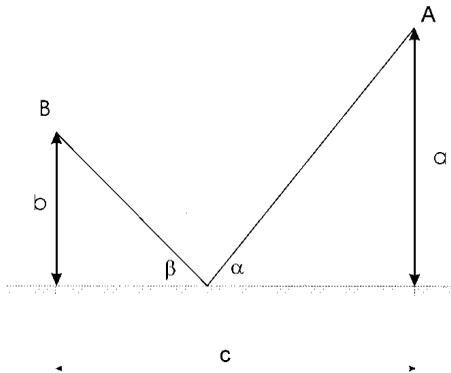


Рис. 1.4. Траектория распространения света из точки A в точку B при отражении от плоскости C

Пусть свет движется со скоростью v . Тогда время $t(\alpha)$ прохождения света из точки A в точку B в результате отражения составляет

$$t(\alpha) = \frac{a}{v \sin \alpha} + \frac{b}{v \sin \beta(\alpha)}, \quad (1.4)$$

где a и b – наименьшие расстояния от точек А и В до зеркала, соответственно. Для определения зависимости между углами падения α и отражения β найдем минимальное время t , для этого нужно определить производную выражения (1.4) и приравнять ее к 0:

$$\frac{dt(\alpha)}{d\alpha} = 0.$$

Получаем соотношение

$$\frac{a \cos \alpha}{\sin^2 \alpha} + \frac{b \cos \beta(\alpha)}{\sin^2 \beta(\alpha)} \frac{d\beta(\alpha)}{d\alpha} = 0, \quad (1.5)$$

в выражении (1.5) слишком много неизвестных для получения зависимости между углами α и β .

Для окончательного завершения математической модели необходимо использовать условие постоянства расстояния c :

$$c = \frac{a}{\tan \alpha} + \frac{b}{\tan \beta(\alpha)}. \quad (1.6)$$

Производная величины c по углу α в силу ее постоянства также равна 0:

$$\frac{a}{\sin^2 \alpha} + \frac{b}{\sin^2 \beta(\alpha)} \frac{d\beta}{d\alpha} = 0. \quad (1.7)$$

Выражения (1.5) и (1.7) составляют полноценную математическую модель и позволяют после несложных преобразований получить взаимосвязь $\cos \alpha = \cos \beta$.

Таким образом, на основе простейшей математической модели, разработанной на основе вариационного принципа Ферма, получен закон отражения, декларирующий равенство углов падения и отражения.

1.3. Применение аналогий при построении моделей

Существует немалое количество объектов, для которых не существует ни фундаментальных законов, ни вариационных принципов. Но математические модели для таких объектов также нужно создавать. В этом случае используется метод аналогий, при котором для описываемого объекта ищется максимально близкий по характеру объект, для которого существуют фундаментальные законы или вариационные принципы.

В качестве примера рассмотрим модель, описывающую динамику изменения численности населения. Основные процессы в популяции напоминают процессы, проходящие при ядерных реакциях. Т. е., можно использовать этот факт для создания математической модели. Исторически эта модель была создана средневековым монахом Мальтусом на основании предположения, что изменение численности населения пропорционально разнице коэффициентов рождаемости $\alpha(t)$ и смертности $\beta(t)$, умноженной на текущую численность населения $N(t)$:

$$\frac{dN(t)}{dt} = [\alpha(t) - \beta(t)]N(t). \quad (1.8)$$

Решение уравнения (1.8) можно записать в общем виде как:

$$N(t) = N(t_0) \exp \left\{ \int_{t_0}^t [\alpha(t) - \beta(t)] dt \right\}, \quad (1.9)$$

где t_0 и t – начальное и конечное время, соответственно.

При постоянных коэффициентах рождаемости и смертности графики изменения численности населения выглядят как экспоненциальный рост или экспоненциальное убывание (рис. 1.5).

Модель Мальтуса является простейшей моделью, описывающей изменение численности населения. За счет функционального

вида коэффициентов рождаемости и смертности эта модель может описать любую ситуацию, но при этом определение $\alpha(t)$ и $\beta(t)$ будет являться отдельной и очень трудной задачей.

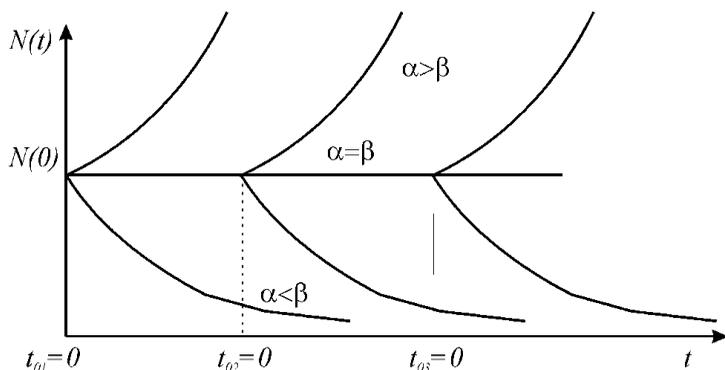


Рис. 1.5. Изменение численности населения в модели Мальтуса при разных значениях коэффициентов рождаемости и смертности

Также модель популяций является одной из первых математических моделей, которые сыграли важную роль во многих областях человеческой деятельности. В частности, она привела к появлению большого количества общественных и политических движений, призывающих бороться с ростом населения, подчас весьма жесткими методами.

1.4. Нелинейность математических моделей

Простота рассмотренных выше моделей во многом связана с их линейностью. В математическом плане это важное понятие означает, что справедлив принцип суперпозиции, т. е. любая линейная комбинация решений (например, их сумма) также является решением задачи. Пользуясь принципом суперпозиции, нетрудно, найдя решение в каком-либо частном случае, построить решение в

более общей ситуации. Поэтому о качественных свойствах общего случая можно судить по свойствам частного – различие между двумя решениями носит лишь количественный характер [1].

Для нелинейных явлений, математические модели которых не подчиняются принципу суперпозиции, знание о поведении части объекта еще не гарантирует знания поведения всего объекта, а его отклик на изменение условий может качественно зависеть от величины этого изменения.

Большинство реальных процессов и соответствующих им математических моделей нелинейны. Линейные же модели отвечают весьма частным случаям и, как правило, служат лишь первым приближением к реальности. Например, популяционные модели сразу становятся нелинейными, если принять во внимание ограниченность доступных для популяции ресурсов [1]. Используем два следующих предположения.

1. Существует «равновесная» численность популяции N_p , которую может обеспечить окружающая среда.

2. Скорость изменения численности популяции пропорциональна самой численности, умноженной (в отличие от модели Мальтуса) на величину ее отклонения от равновесного значения:

$$\frac{dN}{dt} = \alpha \left(1 - \frac{N}{N_p} \right) N . \quad (1.10)$$

Приведем (1.10) к виду

$$\frac{dN}{N_p - N} + \frac{dN}{N} = \alpha dt .$$

После интегрирования получим

$$-\ln(N_p - N) + \ln N = \alpha t + C .$$

Очевидно, что константа C равна правой части уравнения при $t = t_0$.

$$C = \ln \frac{N_0}{N_p - N_0},$$

где $N_0 = N(t_0)$. В результате, полное решение уравнения (1.10) записывается как:

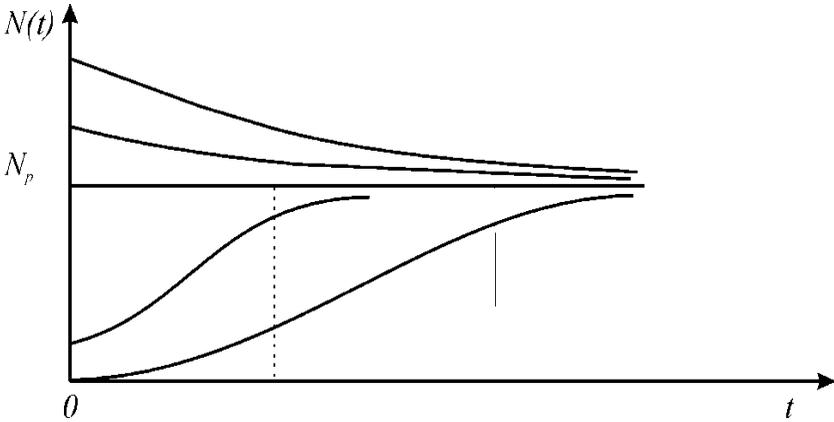


Рис. 1.6. Динамика изменения численности населения при ограниченности ресурсов при разных начальных численностях

$$N(t) = \frac{N_p N_0 \exp(\alpha t)}{N_p - N_0 [1 - \exp(\alpha t)]}. \quad (1.11)$$

Модель развития популяции (1.11) называется логистической поскольку, динамика изменения численности населения в этой модели описывается логистическими кривыми (рис. 1.6).

Логистическая модель более реалистично отражает динамику популяции в сравнении с моделью Мальтуса, но сама она при необходимости становится нелинейной и поэтому более сложной. Заметим, что предположения о механизмах насыщения используются при построении многих моделей в различных областях знаний.

1.5. Этапы построения математической модели

1. Конструирование модели начинается со словесно-смыслового описания объекта или явления. Помимо сведений общего характера о природе объекта и целях его исследования эта стадия может содержать также некоторые предположения (невесомый стержень, толстый слой вещества, прямолинейное распространение световых лучей и т. д.) [1]. Данный этап можно назвать формулировкой предмодели.

2. Следующий этап – завершение идеализации объекта. Отбрасываются все факторы и эффекты, которые представляются несущественными для требуемой точности его моделирования.

По возможности, идеализирующие предположения записываются в математической форме, что позволяет осуществлять количественный контроль их выполнения.

3. После выполнения первых двух этапов можно переходить к выбору или формулировке закона (вариационного принципа, аналогии и т. п.), которому подчиняется объект, и его записи в математической форме. При необходимости используются дополнительные сведения об объекте, также записываемые математически (например, постоянство величины c для всех траекторий лучей света, вытекающее из геометрии задачи). Следует иметь в виду, что даже для простых объектов выбор соответствующего закона – отнюдь не тривиальная задача.

4. Завершает формулировку модели ее «оснащение». Например, необходимо задать сведения о начальном состоянии объекта, цель исследования модели (найти закон преломления света, достичь понимания закономерностей изменения популяции, и т. п.).

5. Построенная модель изучается всеми доступными исследователю методами, в том числе со взаимной проверкой различных подходов. Большинство моделей не поддаются чисто теоретическому анализу, и поэтому необходимо широко использовать вычислительные методы. Это обстоятельство особенно важно при

изучении нелинейных объектов, так как их качественное поведение заранее, как правило, неизвестно.

6. В результате исследования модели не только достигается поставленная цель, но и должна быть установлена всеми возможными способами (сравнением с практикой, сопоставлением с другими подходами) ее адекватность – соответствие объекту и сформулированным предположениям. Неадекватная модель может дать результат, сколь угодно отличающийся от истинного, и должна быть либо отброшена, либо соответствующим образом модифицирована.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В МЕХАНИКЕ

Все явления природы представляют собой движение различных форм материи. Всякое изменение материи называют движением. Одним из простейших является механическое движение – перемещение материальных объектов в пространстве без рассмотрения физических свойств, движущихся материальных объектов. Механическое движение обычно входит составной частью в более сложные виды движения.

Пространство, время и материя являются сложными понятиями. В механике используются упрощенные модели. Причем можно выделить четыре области, в которых используются разные математические модели. Для разделения областей применения разных математических моделей воспользуемся значением двух фундаментальных физических констант.

В чем же различия этих моделей? Так, например, теория относительности описывает пространственно-временной континуум, тогда как квантовая теория описывает дискретный мир. В физике была показана эквивалентность корпускулярно-волнового дуализма и квантовой неопределенности. Более того, принцип неопределенности Гейзенберга и формула суммирования Пуассона представляют собой категории, обратные друг другу. И вместе они образуют дихотомию «гладкость-дискретность», которая, по видимому, является одной из основных принципов природы. Поэтому мы можем рассматривать корпускулярно-волновой дуализм как один из примеров дуализма «гладкость-дискретность», когда волны гладкие, а частицы дискретны.

Этот принцип не только соединяет микроскопический мир (квантовая теория) с макроскопическим миром (теория относительности), как показано в таблице 2.1, но также возникает внутри

этих миров, поскольку гладкость является обратной величиной (посредством преобразования Фурье) дискретности, и, наоборот, дискретность является обратной (посредством преобразования Фурье) величиной гладкости. Здесь \hbar – постоянная Планка, c – максимальная скорость изменений (скорость света).

Таблица 2.1. Различные приближения в механике

$\hbar = const.; c \rightarrow \infty$ квантовая механика	$\hbar = const.; c = const.$ квантовая теория поля
$\hbar \rightarrow 0; c \rightarrow \infty$ классическая механика	$\hbar \rightarrow 0; c = const.$ релятивистская механика

2.1. Классическая механика

Относится к теории, описывающей движение макроскопических объектов.

Пространство считается независимым от времени и движущейся в нем материи. Принимают, что оно обладает всеми геометрическими свойствами евклидовой геометрии. Время считают универсальным не связанным с пространством и движущейся материей. Основные модели: материальная точка, абсолютно твердое тело.

Материальной точкой называют простейшую модель материального тела, размеры которого достаточно малы и, которое можно принять за геометрическую точку, имеющую определенную массу.

Механической системой называется любая совокупность материальных точек.

Абсолютно твердым телом называют механическую систему, расстояния, между точками которой не изменяются при любых взаимодействиях.

Для описания движения используется радиус-вектор $\vec{r} = (x, y, z)$ положения тела в инерциальной декартовой системе отсчёта.

В одномерном случае для преобразования между системами отсчета можно записать преобразования Галилея:

$$\begin{cases} x = x' + V, \\ t = t'. \end{cases} \quad (2.1)$$

Преобразования Галилея отражают на языке математики все сказанное ранее о моделях пространства и времени в классической механике.

Математические модели в классической механике представляют собой системы уравнений движения и являются наиболее простыми из всех.

2.2. Релятивистская механика

Пространство и время в релятивистской механике зависят от скорости движения и друг от друга и связаны преобразованием Лоренца

$$\begin{aligned} x &= \frac{x' + vt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; y = y'; z = z', \\ t &= \frac{t' + \left(\frac{v}{c^2}\right)x'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Таким образом, математическая модель пространства в релятивистской механике постулирует наличие предельной скорости. Наличие релятивистской постоянной c означает, что между пространством и временем появляется прямая связь.

$$(c\Delta t)^2 = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \quad (2.3)$$

Из моделей, используемых в классической механике, в релятивистской механике используется только модель материальной точки.

Математические модели для этого раздела механики незначительно усложняются.

2.3. Квантовая механика

Описание положения объекта и его перемещение описываются в квантовой механике с помощью волновой функции. Волновая функция – комплексная амплитуда вероятности $\Psi(x, y, z, t)$, удовлетворяющая уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\vec{r})\Psi, \quad (2.4)$$

где $U(\vec{r})$ – потенциальное поле, в котором находится объект массой m .

Математические модели в квантовой механике представляют собой совокупность уравнений Шредингера, т.е. уравнений в частных производных. По вычислительной сложности такие математические модели намного превосходят модели классической механики.

2.4. Квантовая теория поля

Данный раздел является наиболее тяжелым для моделирования, поскольку в нем сочетаются трудности, присущие релятивистской и квантовой механикам.

В рамках настоящего курса детально рассматриваются математические модели классической механики, поскольку по сравнению с другими приближениями их реализация не сложна, а также отличается невысокой вычислительной сложностью, что обеспечивает быстроту получения результатов моделирования в ходе лабораторных работ. В курсе не будут рассматриваться математические модели релятивистской механики, квантовой механики и квантовой теории поля.

2.5. Основные способы построения математических моделей в механике

Рассмотрим основные способы построения математических моделей в механике на основе математической модели горизонтального движения маятника, представляющего собой шарик массой m на пружине, как схематично изображено на рис. 2.1.

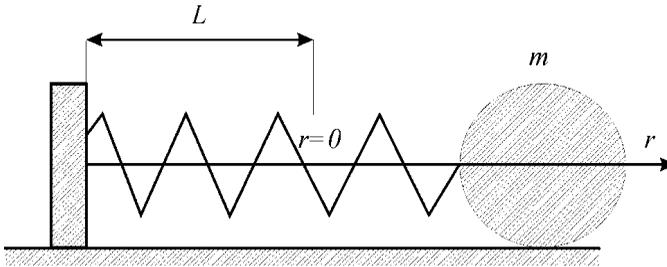


Рис. 2.1. Система «шарик на пружине»

Эта система рассматривается при следующих упрощениях: отсутствует сила трения, отсутствует сопротивление воздуха, упругость пружины k не зависит от растяжения.

1. В качестве фундаментального закона используем второй закон Ньютона, тогда математическая модель получается в наиболее общем виде, как:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}. \quad (2.5)$$

где \vec{F} – равнодействующая всех сил, действующих на тело.

Дополнительно для завершения модели необходимо определить силу, действующую на тело со стороны пружины, используя еще один закон – закон Гука:

$$F = -kr, \quad (2.6)$$

где r – отклонение от положения равновесия.

В окончательном виде, подставляя (2.6) в (2.5) можно записать выражение для отклонения от положения равновесия, как:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr . \quad (2.7)$$

Далее модель (2.7) нужно дополнить начальным условием и можно формировать алгоритм и программу. Но для такой простейшей системы существует и аналитическое решение в виде

$$r = A \sin \omega t + B \cos \omega t ,$$

где $\omega = \sqrt{k/m}$ – частота колебаний, A и B – амплитуды осцилляций.

2. В качестве фундаментального закона используем закон сохранения энергии.

В дифференциальной форме закон сохранения энергии механической системы

$$\frac{dE}{dt} = 0 , \quad (2.8)$$

где E – полная механическая энергия системы, которая складывается из суммы кинетической энергии

$$E_{\text{к}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{m(dr/dt)^2}{2} \quad (2.9)$$

и потенциальной энергии

$$E_{\text{п}} = -\int_0^R F(r') dr' = \int_0^r kr' dr' = k \frac{r^2}{2} . \quad (2.10)$$

После подстановки (2.9) и (2.10) в (2.8) получаем

$$m \frac{dr}{dt} \frac{d^2 r}{dt^2} + k \frac{dr}{dt} r = \frac{dr}{dt} \left(m \frac{d^2 r}{dt^2} + kr \right) = 0$$

и окончательно

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} + kr = 0 .$$

Таким образом, получили математическую модель, полностью идентичную модели (2.7).

3. Используем вариационный принцип Гамильтона (принцип наименьшего действия) при построении математической модели.

Введем понятие обобщенных координат $Q(t)$, полностью определяющих положение механической системы в пространстве. Величина $Q(t)$ может быть декартовой координатой (например, координата r в системе «шарик-пружина»), радиусом-вектором, угловой координатой, набором координат материальных точек, составляющих систему, комбинацией параметров практически любой размерности. Величину dQ/dt естественно назвать обобщенной скоростью механической системы в момент времени t . Набор величин $Q(t)$ и dQ/dt определяет состояние механической системы во все моменты времени.

Для описания механической системы вводится функция Лагранжа, построение которой – отдельная тема. В простейших случаях функция Лагранжа имеет ясный смысл и записывается в виде

$$L(Q, dQ/dt) = E_k - E_{\text{п}} .$$

Введем далее величину $S[Q]$, называемую действием:

$$S[Q] = \int_{t_1}^{t_2} L\left(Q, \frac{dQ}{dt}\right) dt . \quad (2.11)$$

Интеграл (2.11) является функционалом от обобщенной координаты $Q(t)$, он ставит в соответствие некоторое число S (действие).

Принцип Гамильтона для механической системы гласит: если система движется по законам механики, то $Q(t)$ – стационарная функция для $S[Q]$, или

$$\left. \frac{d}{d\varepsilon} S[Q + \varepsilon\varphi] \right|_{\varepsilon=0} = 0. \quad (2.12)$$

Фигурирующая в принципе наименьшего действия (2.12) функция $\varphi(t)$ – некоторая пробная функция, обращающаяся в нуль в моменты t_1, t_2 и удовлетворяющая условию, что $Q(t) + \varepsilon\varphi(t)$ – возможная координата данной системы (в остальном, $\varphi(t)$ произвольна).

Смысл принципа (2.12) состоит в том, что из всех априори мыслимых (допускаемых) траекторий (движений) системы между моментами t_1, t_2 выбирается (реализуется) движение, приводящее к минимуму функционала действия (отсюда происходит и название принципа). Функция $\varepsilon\varphi(t)$ называется вариацией величины $Q(t)$.

В качестве обобщенной координаты системы естественно выбрать обычную эйлерову координату шарика $r(t)$. Тогда обобщенная скорость $dr/dt = v(t)$ – обычная скорость шарика. Функция Лагранжа, записывается через уже найденные ранее выражения для кинетической и потенциальной энергии системы:

$$L = \frac{m(dr/dt)^2}{2} - k \frac{r^2}{2}.$$

Функционал действия приобретает вид

$$S[r] = \int_{t_1}^{t_2} L\left(r, \frac{dr}{dt}\right) dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 - \frac{k}{2} r^2 \right] dt.$$

Проведем процедуру использования вариационного принципа

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} S[r + \varepsilon\varphi] &= \frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} \left\{ m \left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + 2\varepsilon \frac{dr}{dt} \frac{d\varphi}{dt} + \varepsilon^2 \left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 \right] - \right. \\ &\quad \left. - k(r^2 + 2r\varepsilon\varphi + \varepsilon^2\varphi^2) \right\} dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ m \left[\frac{dr}{dt} \frac{d\varphi}{dt} + \varepsilon \left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 \right] - k(r\varphi + \varepsilon\varphi^2) \right\} dt. \end{aligned}$$

Подставляем $\varepsilon = 0$:

$$\frac{d}{d\varepsilon} S[r + \varepsilon\varphi] \Big|_{\varepsilon=0} = \int_{t_1}^{t_2} \left(m \frac{dr}{dt} \frac{d\varphi}{dt} - kr\varphi \right) dt = 0.$$

Интеграл слева интегрируем по частям, используя $\varphi(t_1) = \varphi(t_2) = 0$, и получаем:

$$\frac{d}{d\varepsilon} S[r + \varepsilon\varphi] \Big|_{\varepsilon=0} = - \int_{t_1}^{t_2} \varphi \left[m \frac{d^2 r}{dt^2} - kr \right] dt = 0,$$

т. е., в конечном итоге, также получена полностью идентичная математическая модель. Конечно, представленный метод для этой простой системы выглядит излишне сложным, однако, при построении математических моделей сложных систем, в которых, например, присутствуют некие ограничения (связи), использовать первые два способа бывает затруднительным, и в этом случае используется вариационный принцип Гамильтона.

3. УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Математическая модель, построенная для одного объекта, может быть почти в неизменном виде использоваться для объектов с совсем другой физической природой, в том числе для объектов, функционирование которых не описывается фундаментальными законами. Рассмотрим это на примере математической модели колебательных процессов в совершенно разных системах.

3.1. Колебания жидкости в U-образном сосуде

Жидкость занимает часть сосуда U-образной формы, представляющего собой изогнутую трубку с радиусом r_0 , как показано на рис. 3.1. Масса жидкости M_0 , ее плотность ρ_0 . Стенки сосуда идеально гладкие, поверхностным натяжением пренебрегается, атмосферное давление P_0 и ускорение свободного падения g постоянны.

Используем закон сохранения энергии для получения математической модели. Потенциальная энергия системы

$$E_n = -\int_{\bar{h}}^{h_2} P dh_2 = -\int_{\bar{h}}^{h_2} \rho_0 s (h_1 - h) dh, \quad (3.1)$$

где $\bar{h} = (h_1 + h_2)/2$ – высота положения равновесия, $s = \pi r_0^2$ – площадь сечения трубки. Выражение (3.1) может быть найдено в виде:

$$E_n = -\rho_0 s g \left[-h_2^2(t) + Ch_2(t) + C_1 \right].$$

Кинетическая энергия системы

$$E_k = \frac{1}{2} M_0 \left(\frac{dh_2}{dt} \right)^2.$$

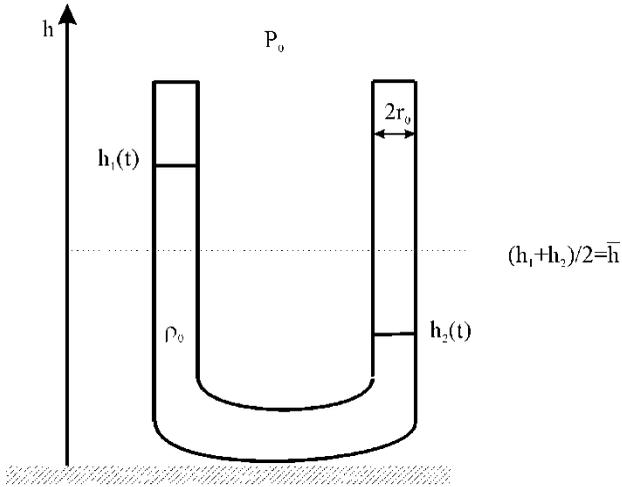


Рис. 3.1. Жидкость в U образном сосуде

Общая механическая энергия системы находится как сумма

$$E(t) = E_k(t) + E_n(t) = \frac{M_0}{2} \left(\frac{dh_2}{dt} \right)^2 - \rho_0 s g (-h_2^2 + Ch_2 + C_1).$$

Для нахождения минимума общей энергии берем производную по времени и приравниваем к 0, получаем

$$M_0 \frac{d^2 h_2}{dt^2} = \rho_0 s g (-2h_2 + C).$$

Очевидно, что точно также можно получить уравнение для h_1 .

$$M_0 \frac{d^2 h_1}{dt^2} = \rho_0 s g (-2h_1 + C).$$

Что дает результирующее уравнение

$$M_0 \frac{d^2 h}{dt^2} = -\rho_0 s g h = -\pi \rho_0 r_0^2 g h,$$

где $h = (h_2 - h_1)/2$ – отклонение уровня жидкости от положения равновесия. Оно, с точностью до обозначений, полностью совпадает с уравнением для системы «шарик-пружина» (в данном случае аналогом шарика служит столб жидкости, а роль пружины играет тяготение).

3.2. Колебательный электрический контур

На рис. 3.2 представлена электрическая схема хорошо знакомого электрического колебательного контура.

Это устройство представляет собой конденсатор, соединенный с индуктивной катушкой. В момент $t = 0$ цепь замыкается, и заряд с обкладок конденсатора начинает распространяться по цепи. Сопротивление проводов будем считать равным нулю, емкость конденсатора равна C , индуктивность катушки L . Для изменяющейся со временем величины $q(t)$, где $q(t)$ – заряд на обкладках конденсатора, необходимо получить соответствующее уравнение. Очевидно, что ток $i(t)$ и напряжение $v(t)$ также являются функция-

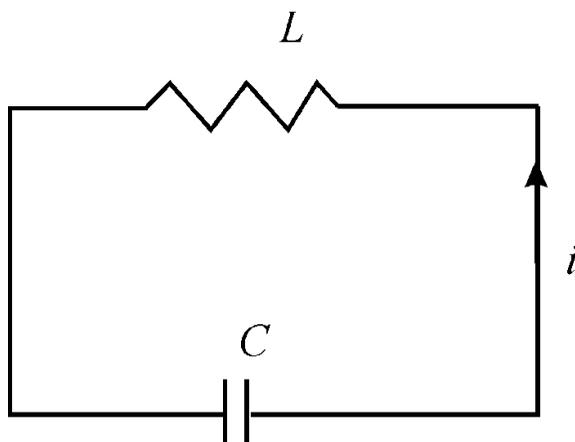


Рис. 3.2. Схема электрического колебательного контура

ми времени. По физическому смыслу величины C в любой момент времени имеем равенство $v(t) = q(t)/C$ (емкость равна величине заряда, который необходимо поместить на обкладки конденсатора для увеличения разности потенциалов между ними на один Вольт). При переменном токе в катушке возникает электродвижущая сила самоиндукции, равная $\varepsilon = -Ldi/dt$.

Закон Ома для цепи в отсутствие сопротивления записывается следующим образом:

$$q(t)C = -\varepsilon(t) = L \frac{di}{dt}.$$

Учитывая соотношение для тока на катушке и заряда на обкладках конденсатора

$$i = -\frac{dq}{dt},$$

дифференциальное уравнение для заряда записывается как

$$L \frac{d^2q}{dt^2} = -Cq.$$

В этой системе колебания происходят так же, как и в системе «шарик-пружина».

3.3. Малые колебания при взаимодействии двух биологических популяций

Пусть на одной и той же территории проживают две биологические популяции с численностями $N(t)$ и $M(t)$, причем первая травоядная, а вторая употребляет в пищу представителей первой популяции.

Скорость изменения $N(t)$ складывается из естественного прироста благодаря рождаемости и из скорости убывания благодаря соседству со второй популяцией:

$$\frac{dN}{dt} = (\alpha_1 - \beta_1 M) N,$$

где $\alpha_1 > 0$, $\beta_1 > 0$, член $\beta_1 MN$ описывает вынужденное убывание (естественной смертностью популяции пренебрегаем).

Численность второй популяции растет тем быстрее, чем больше численность первой популяции, а при ее отсутствии уменьшается со скоростью, пропорциональной численности $M(t)$ (тем самым ее рождаемость не учитывается, как и эффект насыщения):

$$\frac{dM}{dt} = (-\alpha_2 + \beta_2 N) M,$$

где $\alpha_2 > 0$, $\beta_2 > 0$.

Эту математическую модель часто называют модель «хищник-жертва», а систему уравнений – системой уравнений Лотки-Вольтера.

В этой системе имеется точка равновесия

$$\begin{cases} M_0 = \alpha_1 / \beta_1, \\ N_0 = \alpha_2 / \beta_2. \end{cases}$$

Пусть в системе имеется малое отклонение от точки равновесия

$$N = N_0 + n, M = M_0 + m, n \ll N_0, m \ll M_0.$$

Получаем систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = [\alpha_1 - \beta_1 (M_0 + m)] (N_0 + n), \\ \frac{dm}{dt} = [-\alpha_2 + \beta_2 (N_0 + n)] (M_0 + m). \end{cases}$$

Расписываем, выражая точку равновесия через коэффициенты

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = \alpha_1 \frac{\alpha_2}{\beta_2} + \alpha_1 n - \beta_1 \frac{\alpha_1}{\beta_1} \frac{\alpha_2}{\beta_2} - \beta_1 m \frac{\alpha_2}{\beta_2} - \beta_1 n m, \\ \frac{dm}{dt} = -\alpha_2 \frac{\alpha_1}{\beta_1} - \alpha_2 m + \beta_2 \frac{\alpha_2}{\beta_2} \frac{\alpha_1}{\beta_1} + \beta_2 n \frac{\alpha_1}{\beta_1} + \beta_2 n m. \end{cases}$$

Почти все компоненты сокращаются, квадратичные члены сокращаем за счет условия малости отклонений и получаем систему

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = -\beta_1 m \alpha_2 / \beta_2, \\ \frac{dm}{dt} = \beta_2 n \alpha_1 / \beta_1. \end{cases} \quad (3.2)$$

Дифференцируем первое уравнение по времени

$$\frac{d^2 n}{dt^2} = -\beta_1 \frac{\alpha_2}{\beta_2} \frac{dm}{dt}. \quad (3.3)$$

Подставляем в (3.3) второе уравнение системы (3.2):

$$\frac{d^2 n}{dt^2} = -\alpha_1 \alpha_2 n.$$

Т. е., и в этой системе наблюдаются гармонические колебания аналогичные колебаниям шарика на пружине.

3.4. Простейшая модель изменения зарплаты и занятости

Рынок труда, на котором взаимодействуют работодатели и наемные рабочие, характеризуется зарплатой $p(t)$ и числом занятых $N(t)$. Пусть на нем существует равновесие, т. е. ситуация, когда за плату $p_0 > 0$ согласны работать $N_0 > 0$ человек. Если по каким-то причинам это равновесие нарушается (например, по возрасту часть работников уходит на пенсию либо у предпринимателей возникают финансовые трудности), то функции $p(t)$ и $N(t)$ отклоняются от значений p_0, N_0 .

Будем считать, что работодатели изменяют зарплату пропорционально отклонению численности занятых от равновесного значения. Тогда

$$\frac{dp}{dt} = -\alpha_1 (N - N_0), \alpha_1 > 0.$$

Предположим, что число работников увеличивается или уменьшается также пропорционально росту или уменьшению заработной платы относительно значения P_0 , т. е.

$$\frac{dN}{dt} = \alpha_2 (p - p_0), \alpha_2 > 0.$$

Дифференцируя первое уравнение по t и исключая из него с помощью второго уравнения величину N , приходим к стандартной модели колебаний

$$\frac{d^2(p - p_0)}{dt^2} = -\alpha_1 \alpha_2 (p - p_0).$$

Таким образом, колебания на рынке труда подчиняются той же модели, что и колебания шарика на пружине.

4. ПРОСТАЯ ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ЦЕПОЧКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ (ИЕРАРХИЧЕСКИЙ ПОДХОД)

Рассмотрим иерархический подход на примере шарика на пружине. Суть подхода в том, что изначально простая модель постепенно усложняется, в нее вводится учет новых факторов.

4.1. Дополнительная внешняя постоянная сила

Это самое простое усложнение модели

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr + F(r, t), \quad F(r, t) = F_0. \quad (4.1)$$

Это усложнение принципиально не меняет поведение математической модели, так проведя замену $\bar{r} = r - F_0/k$ мы снова возвращаемся к математической модели прежнего вида относительно новой переменной

$$m \frac{d^2 \bar{r}}{dt^2} = -k\bar{r}.$$

4.2. Дополнительная внешняя периодическая сила

В случае с периодической внешней силой математическая модель существенно меняется:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr + F(t) = -kr + F_0 \sin \omega_1 t, \quad (4.2)$$

где F_0 и ω_1 – амплитуда и частота вынуждающей силы, соответственно. К общему решению в виде гармонических колебаний добавляется частное решение в виде

$$r_1(t) = C \sin \omega_1 t, \quad (4.3)$$

где C – амплитуда колебаний. Подставляем (4.3) в (4.2):

$$-mC\omega_1^2 \sin \omega_1 t = -kC \sin \omega_1 t + F_0 \sin \omega_1 t. \quad (4.4)$$

Решая (4.4), получаем выражение для C :

$$C = \frac{F_0}{k - m\omega_1^2} = \frac{F_0}{m(\omega^2 - \omega_1^2)}, \quad (4.5)$$

где $\omega = \sqrt{k/m}$ – собственная частота системы. Таким образом, общее решение записывается как:

$$r(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t + \frac{F_0}{m(\omega^2 - \omega_1^2)} \sin \omega_1 t. \quad (4.6)$$

Решение (4.6) принципиально отличается от предыдущих, поскольку в этом решении присутствует такой эффект, как резонанс (бесконечное возрастание амплитуды колебаний на собственной частоте).

4.3. Учет силы трения

При учете такого повсеместного и простого явления как сила трения математическая модель сразу становится слишком сложной для аналитического решения

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr - k_1 mg \operatorname{sign} \frac{dr}{dt}, \quad (4.7)$$

где k_1 – коэффициент трения. Все, что можно сделать теоретическими методами, – проанализировать характер изменения полной механической энергии системы. Перенесем силу упругости в (4.7) в левую часть:

$$m \frac{dv}{dt} + kr = -k_1 mg \operatorname{sign} v .$$

Умножим обе части уравнения на $v/2$:

$$m \frac{v}{2} \frac{dv}{dt} + kr \frac{v}{2} = -k_1 mg \frac{v}{2} \operatorname{sign} v .$$

Поскольку, по определению, скорость – это производная координаты по времени, можно записать:

$$\frac{m}{2} \frac{dv^2}{dt} + \frac{k}{2} \frac{dr^2}{dt} = -k_1 mg |v| .$$

Внесем в левой части все под знак одной производной

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{kr^2}{2} \right) = -k_1 mg |v| .$$

Таким образом, из-за свойств произведения в правой части

$$\frac{dE(t)}{dt} \leq 0 ,$$

что описывает безусловное снижение полной энергии системы в результате учета силы трения.

4.4. Учет силы вязкого трения

Учет вязкого трения, усложняет модель не столь сильно, как учет сухого трения:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr + F(v) = -kr - \mu \frac{dr}{dt} , \quad (4.8)$$

где μ – коэффициент вязкости. Введем замену

$$r(t) = \bar{r}(t) \exp(\alpha t) . \quad (4.9)$$

После подстановки (4.9) в (4.8) получим:

$$m \left(\frac{d^2 \bar{r}}{dt^2} + 2\alpha \frac{d\bar{r}}{dt} + \alpha^2 \bar{r} \right) \exp(\alpha t) = \left(-k\bar{r} - \mu \frac{d\bar{r}}{dt} - \mu\alpha \bar{r} \right) \exp(\alpha t).$$

После сокращения в случае $\alpha = -\mu / (2m)$ получим:

$$m \frac{d^2 \bar{r}}{dt^2} = - \left(k - \frac{\mu^2}{4m} \right) \bar{r} = -k_1 \bar{r}, \quad (4.10)$$

где $k_1 = k - \mu^2 / (4m)$. На первый взгляд, уравнение (4.10) не сильно отличается от обычного уравнения для гармонических колебаний. На самом деле, отличие довольно существенное, поскольку коэффициент перед координатой в правой части уравнения знакпеременный и существуют три различных случая.

1. $k_1 > 0$. В этом случае решение уравнение имеет вид

$$r = \bar{r} \exp(\alpha t) = \exp[-\mu t / (2m)] (A \sin \omega t + B \cos \omega t).$$

Т. е., мы получаем колебания с уменьшающейся со временем амплитудой, как показано на рис. 4.1.

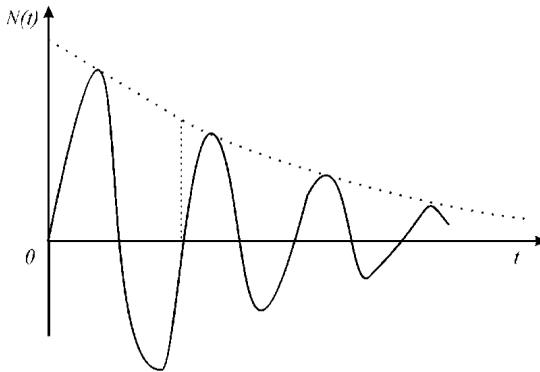


Рис. 4.1. Колебания шарика на пружине в жидкости с невысокой силой вязкого трения

2. $k_1 = 0$. В этом случае решение выглядит как апериодический процесс

$$r(t) = \exp[-\mu / (2m)](ct + c_1) = \exp[-\mu / (2m)] \left[\left(v_0 + \frac{\mu r_0}{2m} \right) t + r_0 \right].$$

На рис. 4.2 показан график изменения положения шарика на пружине.

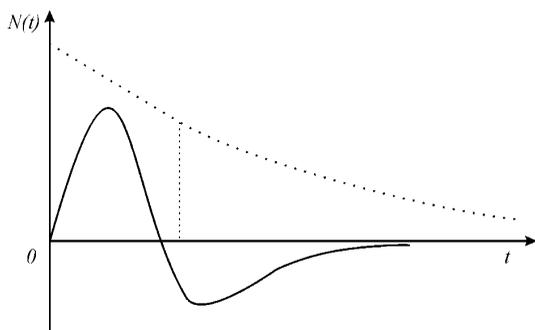


Рис. 4.2. Движение шарика на пружине при $k_1 = 0$

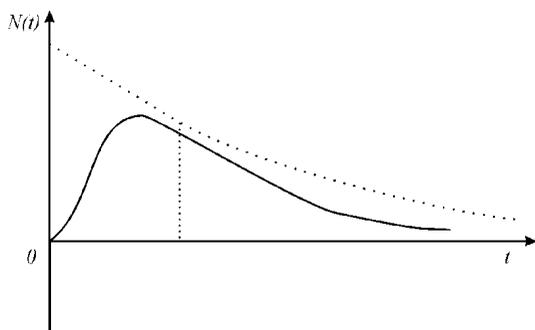


Рис. 4.3. Движение шарика на пружине при $k_1 < 0$

3. $k_1 < 0$. В этом случае шарик на пружине никогда не пересечет точку равновесия, как показано на рис. 4.3.

4.5. Обратная иерархическая цепочка

Приведенные выше примеры иллюстрируют иерархическую цепочку моделей от самой простой к самой сложной. Но возможен и обратный путь, когда сначала создается предельно сложная математическая модель, которая учитывает все возможные факторы функционирования моделируемого объекта:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -k(r, t)r + F\left(r, t, \frac{dr}{dt}\right), k > 0.$$

Затем из этой сложной модели постепенно убирают учет тех факторов, которые не слишком существенно влияют на требуемую точность моделирования.

5. МОДЕЛИ ТРУДНОФОРМАЛИЗУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ

В данном разделе мы подробно рассмотрим математические модели объектов, для которых нет фундаментальных законов их функционирования.

5.1. Динамика скопления амёб

Амеба – одноклеточный организм размером около десяти микрон (10^{-3} см), обитающий в почве и передвигающийся в ней с помощью ложноножек, т. е. частей своего тела. Питаются амебы в основном бактериями, поглощая их вместе с землей (если пищи достаточно, то амебы размножаются делением на две части). Из наблюдений и эксперимента известно, что динамика развития их сообщества – достаточно большого количества амёб, находящихся на небольшом расстоянии друг от друга, бывает достаточно сложной. Например, в зависимости от внешних условий амебы могут собираться в огромные (до сотен тысяч штук) скопления, которые начинают двигаться как единое целое, хотя индивидуальность каждой амебы сохраняется. По сути, такие скопления являются некой переходной формой между одноклеточными и многоклеточными организмами, и математическое моделирование таких скоплений может помочь в понимании появления первых многоклеточных организмов.

Замечено, что это макроскопическое «организованное» движение происходит в направлении к более высокой концентрации некоторого химического вещества, вырабатываемого самими амебами. Математическая модель динамики скопления амёб базируется на следующих предположениях:

1) расстояние между амебами мало в сравнении с размерами их скоплений (сотни микрон), их можно рассматривать как «сплошную среду» и вводить концентрацию $N(x, y, z, t)$ – число амеб в единице объема;

2) процесс является одномерным, т. е. концентрация амеб и другие величины являются функциями только координаты x и времени t ;

3) амебы не рождаются и не умирают в процессе макроскопического движения, т. е. характерное время движения (несколько часов) мало по отношению к характерным временам размножения и жизни амеб;

4) индивидуальное движение амеб при отсутствии стимулирующих внешних воздействий (пища, тепло и т. д.) беспорядочно, хаотично; выделенных направлений нет, и каждая амеба может с равной вероятностью двигаться как вправо, так и влево;

5) если в среде есть «притягивающее» химическое вещество, то к собственному неупорядоченному движению амеб добавляется их направленное движение в область с большей плотностью этого вещества.

Для амеб можно записать своеобразный закон сохранения в форме

$$\left[N(x, t + dt) - N(x, t) \right] dx = \left[W(x, t) - W(x + dx, t) \right] dt,$$

а также в форме частных производных:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = - \frac{\partial W}{\partial x},$$

где поток W делится на две части $W = W_c + W_d$, W_d – детерминированная часть, W_c – стохастическая часть. Стохастический поток можно описать, используя по аналогии закон Фика (диффузия):

$$W_c = -\mu \frac{\partial N}{\partial x}, \mu > 0.$$

Детерминированный поток, вызванный «притягивающим» веществом, должен быть пропорционален концентрации амёб η и градиенту плотности ρ этого вещества

$$W_d = \eta N \frac{\partial \rho}{\partial x}, \eta > 0.$$

Таким образом, получаем базовое дифференциально уравнение модели:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial N}{\partial x} - \eta N \frac{\partial \rho}{\partial x} \right). \quad (5.1)$$

Уравнение (5.1) недостаточно для создания работоспособной математической модели. Его необходимо дополнить уравнением, описывающим распространение «притягивающего» вещества

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \alpha N - \beta \rho,$$

где αN – описывает процесс выделения «притягивающего» вещества амёбами, а $\beta \rho$ – естественный процесс распада этого вещества.

Естественно, что модель надо оснастить начальными и граничными условиями

$$N(x, 0) = N_0(x), \rho(x, 0) = \rho_0(x),$$

$$N(x_1, t) = N_1(t), \rho(x_1, t) = \rho_1(t),$$

$$N(x_2, t) = N_2(t), \rho(x_2, t) = \rho_2(t).$$

5.2. Случайный марковский процесс

Типичным примером подобного процесса служит движение помещенной в жидкость маленькой твердой частицы, совершающей хаотические перемещения под действием беспорядочных столкновений с молекулами жидкости (броуновское движение). Ее

положение в любой момент времени $t > 0$ задается координатами (x, y, z) трехмерного пространства R^3 . В дальнейшем для упрощения выкладок будем рассматривать одномерное движение, т. е. случайные блуждания броуновской частицы вдоль оси x .

Случайный процесс называется марковским, если по положению точки x в момент времени t однозначно определяется вероятность ее нахождения в произвольный момент $t' > t$ в некоторой части (в любом измеримом подмножестве E) пространства R^1 . Другими словами, это процесс без последействия, когда события, случившиеся в промежутке времени между t и t' , не влияют на положение точки в момент t' . Марковский процесс полностью характеризуется функцией $p(t, x, t', x')$, $x \in R^1$ называемой плотностью вероятности в точке x' , зная которую, нетрудно вычислить вероятность

$$p(x, t, t', E) = \int_{E(x')} p(x, t, t', x') dx'$$

нахождения частицы в некоторой окрестности $E(x')$ точки x' в момент времени t' .

Для функции p выполнено условие нормировки

$$\int_{R^1} p(x, t, t', x') dx' = 1.$$

При построении модели марковского процесса существенным образом используется предположение о его сильной непрерывности. Считается, что частица за малые промежутки времени Δt может получить заметные приращения координаты $\Delta x > \delta$ лишь с малой вероятностью.

Это значит, что для любого $\delta > 0$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x' - x| \geq \delta} p(t - \Delta t, x, t, x') dx' = 0.$$

Предполагается также, что для любого $\delta > 0$ существуют равномерные по x пределы

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x'-x|<\delta} (x'-x) p(t-\Delta t, x, t, x') dx' = b > 0,$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x'-x|<\delta} (x'-x)^2 p(t-\Delta t, x, t, x') dx' = 2a > 0.$$

В общем случае

$$a = a(x, t), b = b(x, t).$$

Также постулируем существование производных $\frac{\partial p}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$.

В качестве своеобразного фундаментального закона для марковских процессов выступает тождество Маркова.

$$p(t, x, t', x') = \int_{R^1} p(t, x, \bar{t}, \bar{x}) p(\bar{t}, \bar{x}, t', x') d\bar{x}, \quad t < \bar{t} < t'.$$

Тождество Маркова фактически означает, что вероятность перемещения в точку x' является суммой перемещений через все возможные промежуточные точки.

Используя тождество Маркова, можно вывести дифференциальное уравнение, описывающее процесс таких случайных блужданий

$$\begin{aligned} & p(t-\Delta t, x, t', x') - p(t, x, t', x') = \\ & = \int_{R^1} p(t-\Delta t, x, t, \bar{x}) p(t, \bar{x}, t', x') d\bar{x} - p(t, x, t', x') \int_{R^1} p(t-\Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x}, \end{aligned}$$

тут первый член расписан через тождество Маркова, второй, по сути, умножен на единичный множитель. Собираем под один интеграл

$$\begin{aligned} & p(t-\Delta t, x, t', x') - p(t, x, t', x') = \\ & = \int_{R^1} [p(t, \bar{x}, t', x') - p(t, x, t', x')] p(t-\Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x}. \end{aligned}$$

Разделим область интегрирования на две части $|\bar{x} - x| \geq \delta, |\bar{x} - x| < \delta$:

$$\frac{p(t - \Delta t, x, t', x') - p(t, x, t', x')}{\Delta t} = I_1 + I_2,$$

где

$$I_1 = \frac{1}{\Delta t} \int_{|\bar{x} - x| \geq \delta} [p(t, \bar{x}, t', x') - p(t, x, t', x')] p(t - \Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x},$$

$$I_2 = \frac{1}{\Delta t} \int_{|\bar{x} - x| < \delta} [p(t, \bar{x}, t', x') - p(t, x, t', x')] p(t - \Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x}.$$

Интеграл за пределами δ окрестности нулевой согласно свойству марковского процесса. Второй интеграл раскладываем в ряд до члена второго порядка

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{\Delta t} \int_{|\bar{x} - x| < \delta} \frac{\partial p(t, x, t', x')}{\partial x} (\bar{x} - x) p(t - \Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x} + \\ &+ \frac{1}{\Delta t} \int_{|\bar{x} - x| < \delta} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(t, x, t', x')}{\partial x^2} (\bar{x} - x)^2 p(t - \Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x} + \\ &\frac{1}{\Delta t} \int_{|\bar{x} - x| < \delta} o[(\bar{x} - x)^2] \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(t, x, t', x')}{\partial x^2} (\bar{x} - x) p(t - \Delta t, x, t, \bar{x}) d\bar{x}. \end{aligned}$$

Пренебрегая членами более высокого порядка малости, получаем уравнение параболического типа

$$\frac{\partial p(t, x, t', x')}{\partial t} = a \frac{\partial^2 p(t, x, t', x')}{\partial x^2} + b \frac{\partial p(t, x, t', x')}{\partial x}.$$

Проведенный вывод имеет и обратную сторону. Любое параболическое уравнение можно решить методом случайных блужданий. Рассмотрим прямоугольную область с некоторым числом узлов сетки, как показано на рис. 5.1.

Пусть в этой области нужно решать параболическое уравнение вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

Для использования метода случайных блужданий функцию u надо аппроксимировать некоторым количеством псевдочастиц в каждом узле

$$u \approx kN,$$

где k – некоторый коэффициент пропорциональности.

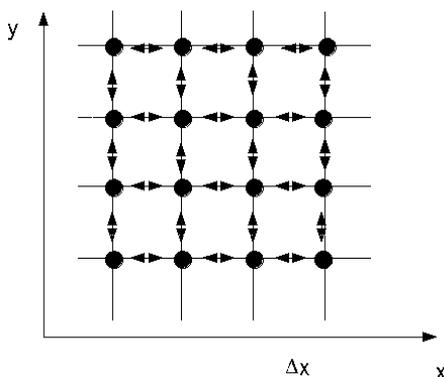


Рис. 5.1. Сетка в области решения параболического уравнения

Стохастически перемещая все частицы в произвольном направлении, мы фактически получаем новое распределение функции u через промежуток времени τ :

$$\tau = \frac{(\Delta x)^2}{D}.$$

Повторяя эту процедуру много раз, мы, тем самым, получаем набор решений параболического уравнения в дискретные моменты времени.

6. МОДЕЛИ СОПЕРНИЧЕСТВА

6.1. Взаимоотношения в системе “хищник - жертва”

Рассмотрим систему, которую мы уже рассматривали в теме «Универсальность математических моделей», но сейчас сделаем это максимально корректно. Основные используемые предположения следующие.

1. Численность популяций зависит только от времени.
2. В отсутствие взаимодействия численность видов изменяется по закону Мальтуса.
3. Естественная смертность жертвы и естественная рождаемость хищника считаются несущественными.
4. Эффект насыщения численности обеих популяций не учитывается.
5. Скорость роста численности жертвы уменьшается пропорционально численности хищников, темп роста хищников увеличивается пропорционально численности жертвы.

Тогда мы получаем хорошо известную систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = (\alpha - cM)N, \\ \frac{dM}{dt} = (-\beta + dN)M. \end{cases} \quad (6.1)$$

Поделим первое уравнение в (6.1) на второе:

$$\frac{dN}{dM} = \frac{(\alpha - cM)N}{(-\beta + dN)M}. \quad (6.2)$$

Координаты точки равновесия

$$M_0 = \frac{\alpha}{c}, N_0 = \frac{\beta}{d}.$$

Преобразуем (6.2)

$$dN(-\beta + dN)M = dM(\alpha - cM)N.$$

После разделения переменных, получаем

$$\beta \frac{dN}{N} - d dN + \alpha \frac{dM}{M} - cdM = 0.$$

Теперь можно проинтегрировать получившееся уравнение

$$\beta \ln N - dN + \alpha \ln M - cM = const.$$

Потенцируем:

$$\ln N^\beta + \ln e^{-dN} + \ln M^\alpha + \ln e^{-cM} = C,$$

где C – константа. В окончательном виде получаем неявную зависимость N от M :

$$N^\beta e^{-dN} = C_1 M^{-\alpha} e^{cM},$$

где $C_1 > 0$. Пространство (N, M) называется фазовым пространством, а эволюция системы в фазовом пространстве называется фазовой кривой. На рис. 6.1 представлено семейство таких фазовых кривых при разном положении относительно точки равновесия.

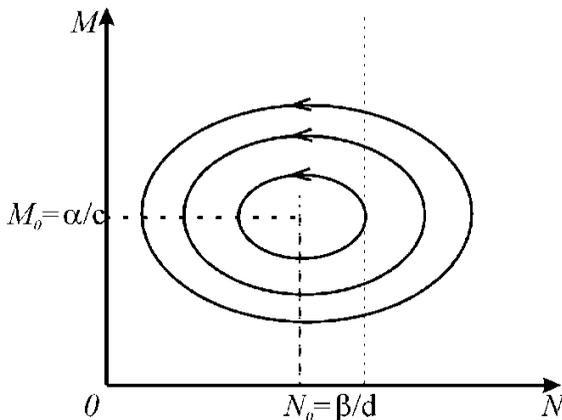


Рис. 6.1. Фазовые кривые системы «хищник-жертва»

Модель очень легко усложнить, например, введя ограничение ресурсов для травоядных

$$\frac{dN}{dt} = (\alpha - cM - aN)N.$$

В этом случае фазовая кривая превращается в спираль, как показано на рис. 6.2.

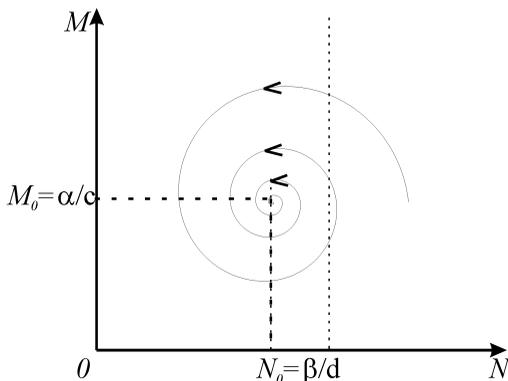


Рис. 6.2. Фазовая кривая системы «хищник-жертва» для случая ограниченности ресурсов

Модель, в которой рассматривается только временная зависимость численности популяции называется точечной. Модель системы «хищник-жертва» легко превращается в модель, учитывающую распределение популяций в пространстве

$$\begin{cases} \frac{\partial N}{\partial t} = (\alpha - cM)N + D_n \nabla^2 N, \\ \frac{\partial M}{\partial t} = (-\beta + dN)M + D_m \nabla^2 M. \end{cases} \quad (6.3)$$

В системе уравнений (6.3) N и M – это концентрации жертв и хищников, соответственно, D_n и D_m – коэффициенты диффузии

жертв и хищников соответственно, $\nabla^2 = \Delta$ – оператор Лапласа. Введенные справа члены учитывают хаотическое перемещение членов популяций по области обитания.

6.2. Гонка вооружений между двумя странами

Предполагается, что общее количество вооружений у каждой страны изменяется со временем в зависимости от трех факторов: количества оружия у противника, износа уже существующего вооружения и степени недоверия между противниками. Темпы прироста и уменьшения вооружений пропорциональны указанным факторам, т. е.

$$\begin{aligned}\frac{dM_1(t)}{dt} &= \alpha_1(t)M_2(t) - \beta_1(t)M_1(t) + \gamma_1(t), \\ \frac{dM_2(t)}{dt} &= \alpha_2(t)M_1(t) - \beta_2(t)M_2(t) + \gamma_2(t),\end{aligned}$$

где $M_1(t) \geq 0$, $M_2(t) \geq 0$, коэффициенты α – прирост вооружений, коэффициенты β – естественная убыль вооружений, функции γ – уровень взаимной настороженности.

Определим точку равновесия системы при постоянных коэффициентах

$$\begin{cases} \frac{dM_1^0(t)}{dt} = 0, \\ \frac{dM_2^0(t)}{dt} = 0. \end{cases}$$

Получаем

$$\begin{cases} \alpha_1 M_2^0 - \beta_1 M_1^0 + \gamma_1 = 0, \\ \alpha_2 M_1^0 - \beta_2 M_2^0 + \gamma_2 = 0. \end{cases} \quad (6.4)$$

Решением системы уравнений (6.4) является точка равновесия

$$M_1^0 = \frac{\alpha_1 \gamma_2 + \beta_2 \gamma_1}{\beta_1 \beta_2 - \alpha_1 \alpha_2},$$

$$M_2^0 = \frac{\alpha_2 \gamma_1 + \beta_1 \gamma_2}{\beta_1 \beta_2 - \alpha_1 \alpha_2}.$$

На рис. 6.3 представлено семейство фазовых кривых системы. Пунктирные линии – это изоклины: $M_2 = \frac{\alpha_2}{\beta_2} M_1 + \frac{\gamma_2}{\beta_2}$ изоклина нуля, $M_2 = \frac{\beta_1}{\alpha_1} M_1 - \frac{\gamma_1}{\alpha_1}$ – изоклина бесконечности. При нулевой взаимной настороженности точка равновесия находится в точке $(0, 0)$.

6.3. Боевые действия двух армий

В противоборстве могут принимать участие как регулярные армии, так и партизанские соединения. Главной характеристикой соперников в рассматриваемых моделях являются численности сторон $N_1(t) \geq 0$ и $N_2(t) \geq 0$. Если в какой-то момент времени одна из численностей обращается в нуль, то данная сторона считается потерпевшей поражение (притом, что в этот момент численность другой стороны положительна).

В случае действий между регулярными частями динамика их численности определяется тремя факторами:

1) скоростью уменьшения состава из-за причин, непосредственно не связанных с боевыми действиями (болезни, травмы, дезертирство);

2) темпом потерь, обусловленных боевыми действиями противоборствующей стороны (которые в свою очередь определяются качеством ее стратегии и тактики, уровнем морального духа и профессионализмом бойцов, вооружениями и т. д.);

3) скоростью поступления подкреплений, которая считается некоторой заданной функцией времени t .

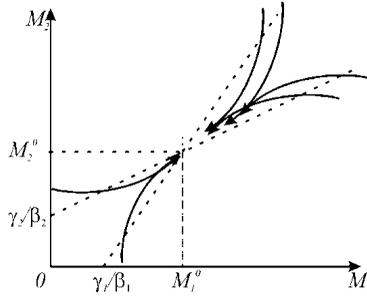


Рис. 6.3. Фазовые кривые системы гонки вооружений

При этих предположениях получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dN_1(t)}{dt} &= -\alpha_1(t)N_1(t) - \beta_1(t)N_2(t) + \gamma_1(t), \\ \frac{dN_2(t)}{dt} &= -\alpha_2(t)N_2(t) - \beta_2(t)N_1(t) + \gamma_2(t). \end{aligned} \quad (6.5)$$

В (6.5) коэффициенты $\alpha_1, \alpha_2 \geq 0$ характеризуют скорости потерь в силу причин, непосредственно не связанных с боевыми действиями, $\beta_1, \beta_2 \geq 0$ – темпы потерь из-за действий соперника, γ_1, γ_2 – скорости поступления подкреплений.

Впервые математическую модель в виде (6.5) предложил в 1916 году русский военный инженер Федоров, но в настоящий момент времени ее называют первой моделью Ланчестера.

Вторая модель Ланчестера рассматривает противостояние регулярной и партизанской армий. Отличия в том, что боевые потери партизанской армии пропорциональны произведению ее собственной численности и численности армии противника

$$\begin{aligned} \frac{dN_1(t)}{dt} &= -\alpha_1(t)N_1(t) - \beta_1(t)N_2(t) + \gamma_1(t), \\ \frac{dN_2(t)}{dt} &= -\alpha_2(t)N_2(t) - \beta_2(t)N_1(t)N_2(t) + \gamma_2(t). \end{aligned}$$

Рассмотрим упрощенную ситуацию, когда боестолкновение происходит в короткие сроки, т.е. можно пренебречь подходом подкреплений и небоевыми потерями:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1(t)}{dt} &= -\beta_1 N_2(t), \\ \frac{dN_2(t)}{dt} &= -\beta_2 N_1(t). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Умножим первое уравнение в (6.6) на $\beta_2 N_1$, а второе уравнение на $\beta_1 N_2$. Получаем

$$\beta_2 N_1 \frac{dN_1}{dt} - \beta_1 N_2 \frac{dN_2}{dt} = -\beta_1 \beta_2 N_1 N_2(t) + \beta_1 \beta_2 N_1 N_2(t) = 0.$$

Вносим все под знак производной, получаем

$$\frac{d}{dt} (\beta_2 N_1^2 - \beta_1 N_2^2) = 0.$$

После интегрирования, получаем

$$\beta_2 N_1^2(t) - \beta_1 N_2^2(t) = \beta_2 N_1^2(0) - \beta_1 N_2^2(0) = C. \quad (6.7)$$

Выражение (6.7) называется квадратичным законом боевых действий: $C > 0$ – условие победы первой армии, $C < 0$ – условие победы второй армии. На рис. 6.4 представлены фазовые кривые этой системы.

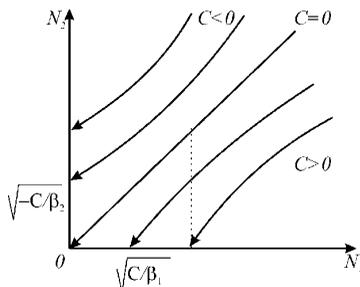


Рис. 6.4. Фазовые кривые для первой модели Ланчестера

Из квадратичного закона боевых действий следует бессмысленность попыток нанесения потерь с помощью армии меньшей численности. Поскольку потери армии большей численности будут существенно меньше при одинаковых коэффициентах боеспособности.

Для этого упрощенного случая довольно легко получается и точное решение

$$N_1(t) = N_1(0) \operatorname{ch} \sqrt{\beta_1 \beta_2} t - N_2(0) \sqrt{\beta_1 \beta_2} \operatorname{sh} \sqrt{\beta_1 \beta_2} t .$$

Для второй модели Ланчестера можно по такой же методике получить другой закон боевых действий:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1(t)}{dt} &= -\beta_1 N_2(t), \\ \frac{dN_2(t)}{dt} &= -\beta_2 N_1(t) N_2(t). \end{aligned} \tag{6.8}$$

Умножим первое уравнение в (6.6) на $\beta_2 N_1$, а второе уравнение на β_1 . Получаем

$$\beta_2 N_1 \frac{dN_1}{dt} - \beta_1 \frac{dN_2}{dt} = -\beta_1 \beta_2 N_1 N_2 + \beta_1 \beta_2 N_1 N_2 = 0 .$$

После внесения под знак производной получаем

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\beta_2 N_1^2(t)}{2} - \beta_1 N_2(t) \right] = 0 .$$

После интегрирования:

$$\frac{\beta_2 N_1^2(t)}{2} - \beta_1 N_2(t) = \frac{\beta_2 N_1^2(0)}{2} - \beta_1 N_2(0) = C_1 .$$

Это параболический закон боевых действий. Фазовые кривые системы для второй модели Ланчестера представлены на рис. 6.5.

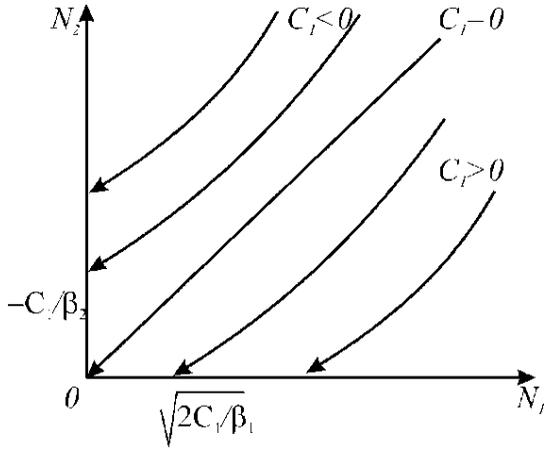


Рис. 6.5. Фазовые кривые для второй системы Ланчестера

7. МОДЕЛИ ФИНАНСОВЫХ И ЭКОНОМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Математические модели экономических процессов можно четко разделить на два вида: экономические модели, созданные для точного анализа локальной экономической ситуации, и модели, созданные для демонстрации некоторых постулатов экономической теории. Модели второго типа обычно совершенно неработоспособны.

7.1. Модель рекламной кампании

Рассмотрим модели рекламной кампании. При организации рекламной кампании фирма начинает рекламировать новый товар или услугу. Подразумевается, что прибыль от будущих продаж должна с полностью покрывать издержки на дорогостоящую кампанию. Ясно, что вначале расходы могут превышать прибыль, поскольку лишь малая часть потенциальных покупателей будет информирована о новинке. Затем, при увеличении числа продаж уже возможно рассчитывать на увеличение прибыли, и, наконец, наступит момент, когда рынок насытится, и рекламировать товар далее станет бессмысленно.

Модель рекламной кампании основывается на следующих основных предположениях. Считается, что величина dN/dt – скорость изменения со временем числа потребителей, узнавших о товаре и готовых купить его (t – время, прошедшее с начала рекламной кампании, $N(t)$ – число уже проинформированных клиентов), – пропорциональна числу покупателей, еще не знающих о нем, т. е. величине $\alpha_1(t) \times [N_0 - N(t)]$, где N_0 – общее число потенциальных платежеспособных покупателей, $\alpha_1(t) > 0$ характеризует интенсивность рекламной кампании (фактически определяемую

затратами на рекламу в данный момент времени). Предполагается также, что узнавшие о товаре потребители тем или иным образом распространяют полученную информацию среди неосведомленных, выступая как бы дополнительными рекламными «агентами» фирмы. Их вклад в скорость равен величине $\alpha_2(t) \times N(t) \times [N_0 - N(t)]$, и он тем больше, чем больше число агентов. Величина $\alpha_2(t) > 0$ характеризует степень общения покупателей между собой (она может быть установлена, например, с помощью опросов). В итоге получаем уравнение

$$\frac{dN}{dt} = [\alpha_1(t) + \alpha_2(t)N(t)](N_0 - N). \quad (7.1)$$

При $\alpha_1(t) \gg \alpha_2(t)$ получается модель похожая на модель Мальтуса, при $\alpha_1(t) \ll \alpha_2(t)$ получается модель похожая на логистическую:

$$\frac{dN}{dt} = N(N_0 - N).$$

Аналогия между обоими процессами заканчивается, если в какой момент времени величина α_1 становится нулевой или даже отрицательной (для этого необходимо, чтобы один или оба коэффициента стали отрицательными). Подобный негативный эффект довольно часто встречается в рекламных кампаниях различного рода и должен побудить их организаторов либо изменить характер рекламы, либо вовсе отказаться от дальнейшей пропаганды. В зависимости от значений величин $\alpha_1(t)$ и $\alpha_2(t)$ мероприятия по увеличению популярности товара могут направляться на улучшение результатов как прямой, так и косвенной рекламы.

Из (7.1) относительно легко вывести соотношение между рекламными издержками и прибылью в самом начале кампании. Обозначим через p величину прибыли от единичной продажи, какой бы она была без затрат на рекламу. Считаем для простоты, что

каждый покупатель приобретает лишь одну единицу товара. Коэффициент $\alpha_1(t)$ по своему смыслу – число равнозначных рекламных действий в единицу времени (например, расклейка одинаковых афиш). Обозначим через s стоимость элементарного акта рекламы. Тогда суммарная прибыль есть

$$P = pN(t) = pN_0 \int_0^t \alpha_1(t) dt. \quad (7.2)$$

Затраты на рекламу

$$S = s \int_0^t \alpha_1(t) dt.$$

И тогда естественное условие на начало рекламной кампании

$$pN_0 > s.$$

При увеличении $N(t)$ отброшенные в (7.1) члены становятся заметными, в частности усиливается действие косвенной рекламы. Поэтому функция $N(t)$ может стать более «быстрой» функцией времени, чем в формуле (7.2). Этот нелинейный эффект в изменении величины $N(t)$ при неизменном темпе роста издержек дает возможность компенсировать финансовую неудачу начальной стадии кампании. Поясним данное утверждение в частном случае уравнения (7.1) с постоянными коэффициентами α_1, α_2 . Заменой

$$\bar{N} = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N$$

уравнение сводится к логистическому

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = \alpha_2 \bar{N} (\bar{N}_0 - \bar{N}), \quad \bar{N}_0 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} + N_0.$$

Решение этого уравнения мы получали ранее, оно выглядит как

$$\bar{N}(t) = \bar{N}_0 \left[1 + \left(\bar{N}_0 \frac{\alpha_2}{\alpha_1} - 1 \right) \exp(-\bar{N}_0 \alpha_2 t) \right]^{-1}.$$

Максимальный рост числа информированных будет наблюдаться в точке

$$\left(\frac{d\bar{N}}{dt} \right)_m = \left(\frac{dN}{dt} \right)_m = \alpha_2 \frac{\bar{N}_0^2}{4} = \frac{(\alpha_1 + \alpha_2 N_0)^2}{4\alpha_2}.$$

И, соответственно, прибыль в этой точке будет определяться по формуле

$$P_m = p \left(\frac{dN}{dt} \right)_m = p \frac{(\alpha_1 + \alpha_2 N_0)^2}{4\alpha_2}.$$

Соответственно можно пересчитать условие эффективности рекламы

$$P_m - P_0 = p \frac{(\alpha_1 - \alpha_2 N_0)^2}{4\alpha_2}.$$

И, окончательно,

$$P_m = p \frac{(\alpha_1 + \alpha_2 N_0)^2}{4\alpha_2} > \alpha_1 s.$$

7.2. Макромодель равновесия рыночной экономики (модель Кейнса)

Любой участник рыночного экономического процесса действует в соответствии со своими индивидуальными интересами (извлечение прибыли, улучшение условий труда, минимизация риска, экономия ресурсов и т. д.). Простейший вариант такой системы – экономика с совершенной конкуренцией, когда каждый субъект экономически ничтожно мал и не оказывает непосред-

ственного влияния на уровень производства, цены, зарплату и другие макропоказатели. В то же время разобщенные действия экономических агентов могут складываться через существующие в системе отношения купли-продажи в совокупную согласованную картину действий работодателей и наемных рабочих, финансистов и вкладчиков и т. д. Если в результате такого коллективного взаимодействия общее производство товаров и услуг в системе согласовано с общим спросом на них, то такое состояние экономики называется равновесным, а устанавливающиеся при этом цены – равновесными рыночными ценами. Баланс между спросом и предложением имеет место, как подразумевается, не при произвольных, а именно при этих рыночных ценах, что означает, в частности, платежеспособность спроса.

Одна из важных задач экономической науки – определение условий равновесия экономики, и в том числе равновесных рыночных цен. Наиболее простые математические модели экономического равновесия строятся при следующих предположениях.

Предположение 1. Совершенная рыночная конкуренция, означающая отсутствие как крупных производственных корпораций (и, тем более, монополий), так и объединений работников, способных диктовать свои условия для всей системы.

Предположение 2. Неизменность производственных возможностей системы: оборудование, производственные помещения, технологии не изменяются со временем.

Предположение 3. Неизменные во времени экономические интересы партнеров: предприниматели не пытаются увеличить свою прибыль, рабочие – зарплату, инвесторов устраивают проценты, получаемые по ценным бумагам, и т. д.

К сожалению, все три условия совершенно неприменимы к современной рыночной экономике, для которой модель Кейнса является своеобразным идеологическим обоснованием.

Однако, рассмотрим подробно эту модель и выводы, которые можно из нее сделать.

Модель Кейнса рассматривает в качестве агентов нанимателей и нанимаемых, потребителей и сберегателей, производителей и инвесторов, действующих на рынках рабочей силы, продуктов и денег, т. е. распределяющих и обменивающих эти товары (труд, продукты, деньги) между собой.

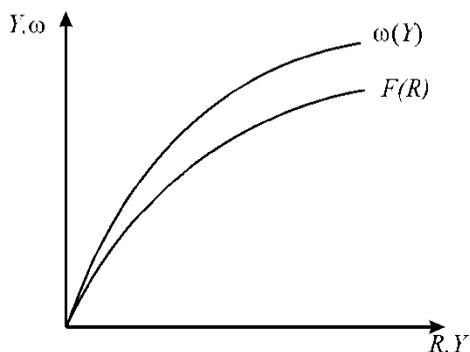


Рис. 7.1. Зависимость между рынками труда (R) и продукта (Y)

Первый макропоказатель системы – национальный доход Y , являющийся единственным (для простоты) продуктом, производимым ею в единицу времени. Этот продукт вырабатывается производственным сектором экономики, а его величина дается функцией F , зависящей от количества и качества ресурсов, состава основных фондов и числа занятых работников R (второй макропоказатель). В соответствии с предположением 2) в состоянии равновесия производственная функция R , а с нею и продукт Y определяется лишь занятостью, т. е.,

$$Y = F(R).$$

Относительно $F(R)$ обычно считается, что $F(0) = 0$, $F'(R) > 0$, $R > 0$ и $F''(R) < 0$ при $R > 0$, как можно увидеть на рис. 7.1. Функ-

ция $F(R)$ обладает свойством «насыщения»: с ростом R выпуск растет все медленнее.

Предположение 4. Зарботная плата s работника равна стоимости продукта, которая была бы потеряна при уменьшении занятости на одну единицу (зарботная плата равна предельному продукту труда).

Заметим, что в этом постулате не учитываются (считаются малыми) другие издержки, которые бы исключились в результате сокращения одного рабочего места (затраты на ресурсы, оборудование и т. д.), что является весьма избыточной идеализацией модели. Таким образом, из постулата 4 получаем

$$\Delta Y^{(1)} p = s,$$

где p – цена продукта,

$$\Delta Y p = s \Delta R,$$

$$\frac{dY}{dR} = \frac{s}{p},$$

$$F'(R) = \frac{s}{p}.$$

Предположение 5. Предложение труда не сдерживает производство.

Предположение 6. Зарботная плата в модели считается заданной.

Предположение 7. Потребляемая часть выпуска зависит от самого выпуска:

$$\omega = \omega(Y).$$

Произведенный продукт частично тратится на потребление, а частично сберегается:

$$Y = S + \omega.$$

где ω – потребляемая часть (в экономику не возвращается), а S – сберегаемая часть, возвращающаяся в экономическую систему (или фондообразующий продукт).

Соотношение между величинами S и ω определяется из следующих соображений. Относительно величины ω считается следующее.

Предположение 8. Потребляемая часть выпуска зависит от величины самого выпуска, т. е. $\omega = \omega(Y)$.

При этом функция $\omega(Y)$ обладает свойством «насыщения» так же, как и функция $F(R)$: чем больше выпуск, тем меньшая доля дополнительного выпуска тратится на потребление (см. рис. 7.1), и тем большая доля сберегается. Величина $d\omega/dY = c(Y)$ называется склонностью к потреблению и лежит в пределах $1 < c < 1$, иначе при малых выпусках потреблялось бы больше продукта, чем производилось бы (величина, описывающая склонность к накоплению $d = 1 - c$).

Фондообразующий продукт

$$S = Y - \omega(Y).$$

В модели считается, что инвестиции эквивалентны отложенному (отнесенному на будущее) потреблению и поэтому определяются еще одним финансовым макропоказателем системы – нормой банковского процента r . Действительно, сделав инвестиции в размере A и получив через год доход $D = Ar$, инвестор ничего не теряет (в данном примере и не выигрывает) по сравнению с вложением этих средств в банк под процент r .

В условиях равновесия предложение фондообразующего продукта $S(Y)$ сбалансировано со спросом на инвестиции $A(r)$:

$$\begin{aligned} S(Y) &= A(r), \\ Y - \omega(Y) &= A(r). \end{aligned}$$

Предположение 9. Спрос на деньги – сумма операционного и спекулятивного спроса: trY – операционный спрос, $I(r)$, $I'(r) < 0$ – спекулятивный спрос,

$$Z = \tau p Y + I(r),$$

где Z – количество денег.

Характерная форма функций A и I представлена на рис. 7.2.

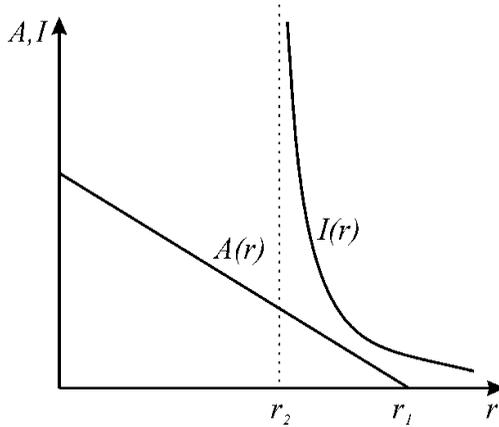


Рис. 7.2. Характерная форма функций $A(r)$ и $I(r)$

Сводя воедино все уравнения, приходим к математической модели рыночного равновесия, полученной в предположениях 1-9:

$$\begin{cases} Y = F(R), \\ F'(R) = s/p, \\ Y - \omega(Y) = A(r), \\ Z = \tau p Y + I(r). \end{cases} \quad (7.3)$$

Систему (7.1) несложно преобразовать к виду

$$-\frac{\tau s F(R)}{F'(R)} + Z = I \left\{ A^{-1} \left[F(R) - \omega(F(r)) \right] \right\}. \quad (7.4)$$

На основе совершенно общих предположений о характере зависимости от R правой и левой частей уравнения (7.4) строится график, показанный на рис. 7.3.

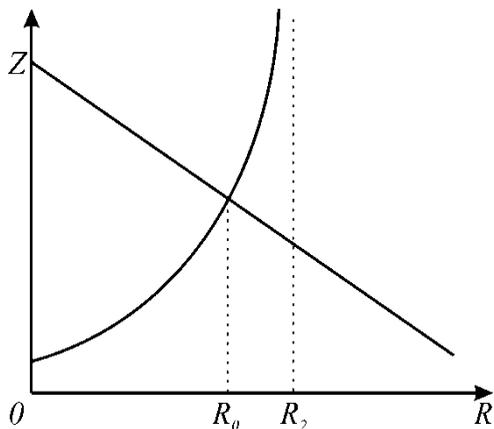


Рис. 7.3. Пересечения графиков для левой и правой части уравнения (7.4)

Вот эта точка пересечения означает, что при предположениях 1-9 рыночная экономика имеет точку равновесия. А вся описанная модель, основанная на нереальных предположениях, является идеологическим основанием свободной рыночной экономики.

8. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

8.1. Общие сведения

Имитационное моделирование – один из наиболее известных и широко распространенных способов математического моделирования, основанный на использовании компьютерной техники. Инструментальные средства имитационного моделирования появились практически одновременно с первыми универсальными алгоритмическими языками программирования, такими как Алгол и Фортран. К настоящему времени, по мнению специалистов, насчитывается около 300 языков моделирования дискретных процессов. Такое широкое распространение средств имитационного моделирования, характерное для 60-70-х годов, определяется сравнительной простотой процедуры построения имитационной модели при условии достижения высокого уровня точности воспроизведения закономерностей функционирования (поведения) реально существующих систем.

Первоначально имитационные модели разрабатывались в интересах проектирования технических систем типа систем массового обслуживания, например, телефонных станций, железнодорожных узлов, аэропортов, морских портов и т.д. В 80-х годах это направление, в известной степени, поддерживалось проблематикой, связанной с проектированием вычислительных сетей. В настоящее время повышенный интерес к средствам имитационного моделирования стимулируется значительными успехами, полученными в области применения методов имитационного моделирования в экономике, а также идеей перевода известных схем моделирования на модные рельсы объектно-ориентированного программирования.

Формальные обозначения различных систем массового обслуживания были предложены Д. Кендаллом в виде $A/B/C/D$, где A и B обозначают законы распределений временных интервалов поступления заявок в систему и длительности обслуживания этих заявок, соответственно; C – число обслуживающих каналов или линий, открытых в системе ($C = 1, 2, \dots$); D – ёмкость накопителя ($D = 1, 2, \dots$).

Возможные обозначения законов распределений интервалов времени появления заявок (A) и длительности обслуживания (B):

- M (Markovian) – распределение Пуассона или экспоненциальное распределение;
- D (Degenerate) – распределение с равномерной плотностью, определённое или фиксированное время обслуживания;
- G (General) – произвольное распределение с независимым интервалами времени появления заявок и обслуживания;
- E_k (Erlang) – распределение Эрланга k -го порядка (т.е. сумма k последовательных экспоненциальных случайных переменных).

8.2. Математические модели систем массового обслуживания

Систему массового обслуживания можно представить как марковский процесс с дискретными состояниями и непрерывным временем. Математическую модель такой системы довольно просто можно сформировать. Рассмотрим пример такой математической модели для полнодоступной системы с двумя линиями обслуживания.

Такая система может находиться в одном из четырех состояний: S_{00} – оба канала свободны, S_{10} – занят первый канал, второй свободен, S_{01} – занят второй канал, первый свободен, S_{11} – заняты оба канала. Переходы из состояния в состояние в системе осу-

ществляется по следующему набору событий: e_0 – приход очередной заявки, e_1 – завершение обслуживания заявки на первом канале, e_2 – завершение обслуживания заявки на втором канале. Вся система представлена в виде блок-схемы на рис. 8.1.

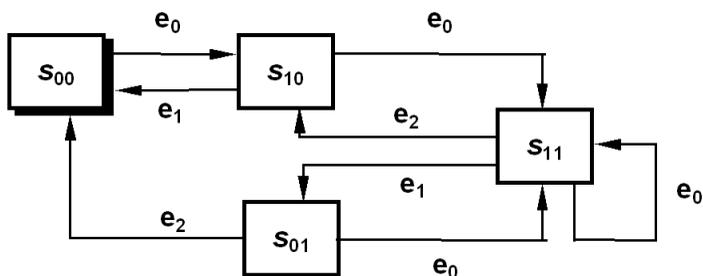


Рис. 8.1. Блок-схема состояний и событий для системы массового обслуживания из двух полностью доступных линий

Система может находиться в каждом из состояний с вероятностями: p_{00} , p_{10} , p_{01} , p_{11} , соответственно, а события осуществляются с интенсивностями λ_0 , λ_1 , λ_2 , соответственно. Динамика системы описывается изменением значения вероятностей нахождения системы в каждом из состояний, для определения зависимостей вероятностей от времени можно составить систему дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
 \frac{dp_{00}}{dt} &= -\lambda_0 p_{00} + \lambda_1 p_{10} + \lambda_2 p_{01}, \\
 \frac{dp_{10}}{dt} &= \lambda_0 p_{00} - \lambda_1 p_{10} - \lambda_0 p_{10} + \lambda_2 p_{11}, \\
 \frac{dp_{01}}{dt} &= -\lambda_2 p_{01} - \lambda_0 p_{01} + \lambda_1 p_{11}, \\
 \frac{dp_{11}}{dt} &= \lambda_0 p_{01} - \lambda_1 p_{11} - \lambda_2 p_{11} - \lambda_0 p_{10}.
 \end{aligned}
 \tag{8.1}$$

Система дифференциальных уравнений (8.1) является основой для полноценной математической модели системы массового обслуживания, которая позволяет получить точные решения для любой ситуации. Однако, математические модели систем массового обслуживания практически не используются. Причина этого – высокая вычислительная сложность таких моделей для реальных систем массового обслуживания с большим числом линий. Количество состояний системы массового обслуживания с числом линий N , а, следовательно, количество уравнений в системе (8.1) равно 2^N . Таким образом, уже для $N = 20$ система вида (8.1) становится слишком вычислительно сложной для современных компьютеров. Таким образом, для моделирования систем массового обслуживания приходится использовать имитационные модели.

8.3. Основные понятия технологии имитационного моделирования

Центральными понятиями технологии имитационного моделирования являются такие понятия, как система, модель, имитационная модель, имитационное моделирование.

Под системой имитационного моделирования понимают реально существующую или подразумеваемую часть окружающего нас мира, выделяемого исследователям с целью ее последующего изучения в течение некоторого периода времени. Предполагается, что система может иметь входы и выходы, через которые осуществляется ее взаимодействие с внешним миром, для которого сама система является “черным ящиком”.

Модель – это некоторая аналогия, такая, что для одной системы, называемой моделируемой, должна существовать другая система – моделирующая, элементы которой с определенной точки зрения подобны элементам первой, т.е. существует некоторое отображение, которое элементам моделируемой системы ставит в

соответствие элементы моделирующей системы. Элементы модели называют объектами. Объекты обладают атрибутами, т.е. определенными свойствами им соответствующими.

Имитационное моделирование применяется для исследования динамических систем, состояния которых изменяется во времени. Имитационная модель – это динамическая модель, которая в процессе исследования системы проходит через ряд последовательных состояний, упорядоченных в соответствии с увеличениями значения особого атрибута – времени моделирования. Этот атрибут присутствует во всех имитационных моделях и называется системным или модельным временем.

Для моделирования систем и сетей связи используются дискретно-событийные имитационные модели. Это такие модели, кроме системного времени, изменяются в процессе работы модели дискретно в моменты наступления некоторых событий.

Имитационное моделирование – это метод исследования, основанный на том, что изучаемая динамическая система заменяется ее имитационной моделью, и с этой моделью проводятся машинные эксперименты с целью получения информации об изучаемой системе. Таким образом, для имитационного моделирования – метода исследования систем и сетей связи – характерно наличие модели и проведения эксперимента с этой целью. Причем несколько связанных между собой экспериментов обычно называют имитационным исследованием, а действие, связанное с однократным проведением имитационного эксперимента с целью получения оценок показателей качества функционирования системы при выбранном наборе параметров, называют прогоном модели.

Поток заявок (или событий, в общем случае) – последовательность заявок, поступающих через какие-либо интервалы или в какие-либо моменты времени. Случайные потоки заявок задаются функциями распределения. Функцией распределения вероятности некоторой случайной величины z называют функцию

$$F(t) = P(z < t), \quad (8.2)$$

где P – вероятность, что $z < t$, где t – определённая величина.

Для организации процедуры “розыгрыша” необходимо иметь случайный механизм розыгрыша. Реализация его может быть различной, но наиболее общим случаем является стандартное устройство, позволяющее решить одну задачу: получить случайную величину, распределённую с постоянной плотностью на отрезке от 0 до 1.

8.4. Методы получения случайных величин на компьютере

8.4.1. Таблицы случайных чисел

Таблицы случайных чисел представляют собой самый старый способ работы со случайными числами на компьютере. Формировались эти таблицы разными способами, самые старые из них формировались вручную.

Для удобства выбора начальной точки таблицы часто формируют в виде двумерного массива, как показано в таблице 8.1.

Наибольшая по размеру таблица содержит около миллиона случайных чисел. В качестве начальной точки часто используется текущее системное время. Недостатков у этого метода два: значительные ресурсы для хранения таблицы случайных чисел в оперативной памяти и их периодичность.

8.4.2. Генераторы случайных чисел

Генераторы случайных чисел – внешние устройства, в которых считывается некий шумовой сигнал. Например, в качестве такого устройства может выступать фотодиод с закрытой от света площадкой или отдельная ячейка КМОП структуры, также закрытой от света. В этих приборах постоянно присутствует некоторое количество так называемых темновых электронов. Количество

этих электронов можно рассматривать как уровень сигнала, который меняется во времени, как показано на рис. 8.2.

Для получения последовательности случайных чисел выбирается некоторый уровень сигнала f_0 и некоторый малый промежуток времени τ . Подсчитывается количество точек пересечения уровнем сигнала значения f_0 . Если количество таких пересечений четное, то генерируется значение $X_0 = \langle 0 \rangle$. Если нечетное, то генерируется значение $X_1 = \langle 1 \rangle$. Уровень сигнала f_0 выбирается таким образом, чтобы формируемая последовательность соответствовала распределению:

Таблица 8.1. Пример заполнения таблицы случайных чисел

Номер строки i	Номер колонки j							
	5	10	15	20	25	30	35	60
5	95183	14683	96585	84761	65044	65183	55567	02879
	08509	97009	47525	88791	93751	70490	17749	89466
	45448	66819	86936	95349	08657	75106	97487	29083
	02230	00022	46390	76658	91934	64676	42429	66736
	13275	96798	51425	67147	15216	71831	16229	03550
10	44439	33385	95151	92374	14683	00323	57667	87552
	17629	80967	42144	58190	24550	62189	94525	87043
	14328	77127	40397	78105	75031	99553	84296	68873
	96896	02466	86706	09507	66840	68509	38033	48343
	09725	80938	27971	01243	29232	28799	88456	69087

$$\begin{bmatrix} X_1 & X_2 \\ p_1 & p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}, \quad (8.3)$$

где X_i – реализация случайной величины, p_i – вероятность этой реализации.

Таким образом, формируется последовательность двоичных чисел. При необходимости формирования чисел с разрядностью N одновременно используется N таких внешних приборов. Время τ относительно невелико составляет несколько миллисекунд. Однако частота работы такого генератора все же существенно ниже частоты необходимой для работы с современным компьютером, поэтому обычно генератором случайных чисел предварительно генерируется таблица случайных чисел достаточная по размеру для решаемой задачи.

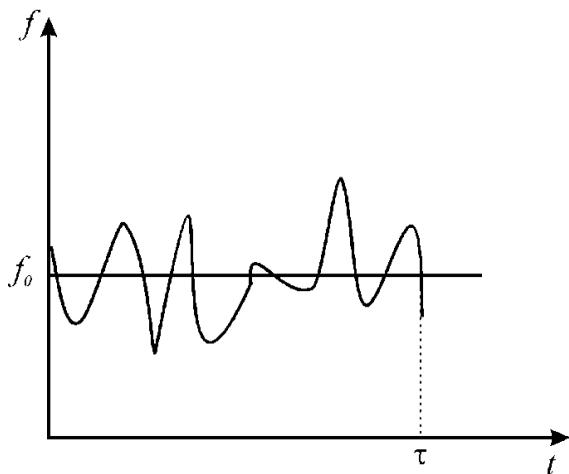


Рис. 8.2. Пример изменения стохастического сигнала

8.4.3. Генераторы псевдослучайных чисел

Для получения последовательности псевдослучайных чисел γ_i используется процедура получения следующего значения на основании предыдущего

$$\gamma_{i+1} = F(\gamma_i). \quad (8.4)$$

Функция F подбирается так, чтобы значения γ_i равномерно заполняли отрезок от 0 до 1.

Самая первая формула для формирования последовательности псевдослучайных чисел была предложена Нейманом. Для генерации предлагалось возведение числа во вторую степень с извлечением его центральной части, например, $0,4569^2=0,20875761 \rightarrow 0,8757$. Формула оказалась неудачной, поскольку последовательность довольно быстро уходит в диапазон малых значений.

В современных генераторах псевдослучайных чисел используются другие методы, например, псевдослучайные числа высокого качества можно получить методом Фибоначчи с запаздываниями [5], такой метод используется в системе Matlab:

$$k_i = \begin{cases} k_{i-a} - k_{i-b}, k_{i-a} \geq k_{i-b}, \\ k_{i-a} - k_{i-b} + 1, k_{i-a} < k_{i-b}, \end{cases} \quad (8.5)$$

где k_i – вещественные числа от 0 до 1, a и b – целые положительные числа, параметры генератора. Для работы генератору необходимо хранить в памяти максимальную величину предыдущих сгенерированных случайных чисел $\max(a, b)$.

Для генераторов, построенных по методу Фибоначчи с запаздыванием, существуют рекомендуемые параметры a и b , которые были подобраны в многочисленных исследованиях. Например, исследователи предлагают следующие значения: $(a, b) = (55, 24)$, $(17, 5)$ или $(97, 33)$. Качество получаемых случайных чисел зависит от значения константы a : чем оно больше, тем выше размерность пространства, в котором сохраняется равномерность случайных векторов, образованных из полученных случайных чисел. В то же время, с увеличением величины константы a увеличивается объём используемой алгоритмом памяти.

Значения $(a, b) = (17, 5)$ рекомендуются для простых приложений. Значения $(a, b) = (55, 24)$ позволяют получать числа, удовлетворительные для большинства криптографических алгоритмов, требовательных к качеству случайных чисел. Значения $(a, b) = (97, 33)$ позволяют получать очень качественные случай-

ные числа и используются в алгоритмах, работающих со случайными векторами высокой размерности.

Генераторы псевдослучайных чисел, основанные на методе Фибоначчи с запаздыванием, используются для целей криптографии. Кроме того, они применяются в математических и статистических расчетах, а также при моделировании случайных процессов.

В данном случае, конечно, получается последовательность полностью детерминированных чисел, но если эти числа соответствуют параметрам распределения стандартной случайной величины, то они ничем от случайных чисел не отличаются, и их можно использовать в имитационном моделировании.

8.4.4. Получение случайных чисел с любым дискретным распределением

Пусть дискретная случайная величина ε задана следующим рядом распределения:

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & \dots & X_n \\ P_1 & P_2 & \dots & P_n \end{bmatrix}. \quad (8.6)$$

В этом случае, преобразование из стандартной случайной величины проходит по простому алгоритму. Отрезок от 0 до 1 разбивается на n отрезков (рис. 8.3).

Считается, что реализация случайной величины X_i состоялась если стандартная случайная величина принадлежит i -му отрезку.

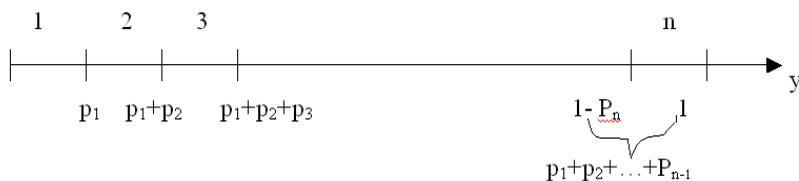


Рис. 8.3. Разбиение отрезка от 0 до 1 на n отрезков для получения дискретной случайной величины с распределением в виде ряда

8.4.5. Получение случайных чисел с любым непрерывным распределением

Если непрерывная случайная величина имеет известную функцию распределения $F(x)$ и функцию плотности распределения $f(x)$. Тогда для получения текущей реализации этой случайной величины нужно решить следующее интегральное уравнение

$$F(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} f(x) dx = \gamma, \quad (8.7)$$

где γ – текущая реализация стандартной случайной величины. Графически смысл этого уравнения показан на рис. 8.4.

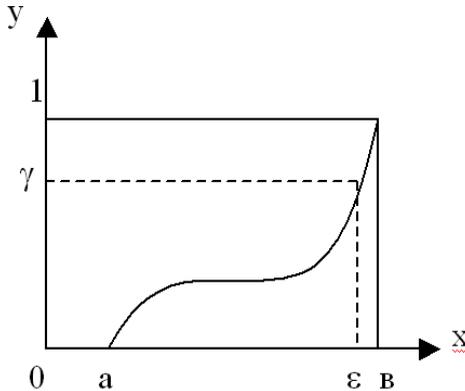


Рис. 8.4. Нахождение реализации ε непрерывной случайной величины

8.5. Простейшая модель

Рассмотрим процесс обслуживания заявок простейшего потока U -линейным пучком при экспоненциальном времени обслуживания заявок. В обозначениях Кендалла: $M/M/U$. Качество обслуживания заявок характеризуется вероятностью потерь, вероятностью того, что заявка не будет обслужена $P_{\text{отказ}}$, средним временем ожидания. Заявка получит отказ в случае в случае занятости всех U линий. Си-

стема массового обслуживания может характеризоваться средним числом занятых линий \bar{k} ; абсолютной пропускной способностью A , определяемой средним числом заявок, обслуживаемых в единицу времени; относительной пропускной способностью Q , определяемой средней долей пришедших заявок, обслуживаемых системой.

Для моделирования процесса обслуживания заявок полнодоступным набором из U линий необходимо разыграть два случайных процесса: процесс поступления заявок и процесс обслуживания заявок. В Марковском процессе число пришедших заявок распределено по закону Пуассона с математическим ожиданием числа заявок $\lambda \bar{t}$ за средний интервал времени \bar{t} , где параметр потока $\lambda(t)$ – интенсивность потока в момент времени t – это предел отношения вероятности поступления хотя бы одной заявки за время $[t, t + \tau)$ к длине этого отрезка времени τ при $\tau \rightarrow 0$:

$$\pi'_1(t, t + \tau) = \lambda(t), \quad (8.8)$$

где $\pi_k(t, t + \tau)$ – это вероятность поступления k и более заявок за промежуток времени $[t, t + \tau)$.

В стационарном пуассоновском потоке промежутки между соседними событиями являются независимыми случайными величинами с одинаковым распределением:

$$F(t) = P(z < t) = 1 - e^{-\lambda t}, t \geq 0, \quad (8.9)$$

где $F(t)$ – это вероятность того, что промежуток времени z между заявками будет меньше определённого промежутка t , что эквивалентно вероятности того, что за промежуток t поступит одна и более заявок.

Для моделирования просеянных простейших потоков, в которых некоторое число заявок периодически теряется, применяют описание потоками Эрланга. Поток Эрланга k -го порядка назы-

вают поток событий, получаемый из стационарного пуассоновского потока отбрасыванием из потока k отсчетов с сохранением $k+1$ -го отсчета. Функция распределения временных интервалов между соседними заявками в потоке Эрланга с интенсивностью λ определяется по формуле

$$F_k(t) = 1 - e^{-\lambda t} \sum_{i=0}^k \frac{(\lambda t)^i}{i!}. \quad (8.10)$$

Таким образом, стационарный пуассоновский поток является потоком Эрланга нулевого порядка.

Для числа заявок K , поступающих за промежуток времени $(0, t)$, математическое ожидание $M[K]$, дисперсия $D[K]$ и среднеквадратическое отклонение $\sigma[K]$ определяются, соответственно, как:

$$M[K] = D[K] = \lambda t, \quad (8.11)$$

$$\sigma[K] = \sqrt{D[K]} = \sqrt{\lambda t}. \quad (8.12)$$

В случае простейшего потока плотность распределения вероятностей промежутков времени между заявками находится в виде:

$$f(t) = \frac{dF(t)}{dt} = \lambda e^{-\lambda t}. \quad (8.13)$$

Для промежутков времени T между заявками можно найти математическое ожидание $M[T]$, дисперсию $D[T]$ и среднеквадратическое отклонение $\sigma[T]$, соответственно:

$$M[T] = \int_0^{\infty} t f(t) dt = 1 / \lambda, \quad (8.14)$$

$$D[T] = \int_0^{\infty} t^2 f(t) dt - M^2(t) = 1 / \lambda^2, \quad (8.15)$$

$$\sigma[T] = \sqrt{D[T]} = 1 / \lambda. \quad (8.16)$$

Промежутки времени между поступлениями заявок Z_{bi} в общем случае имеют показательное распределение и определяются следующим соотношением:

$$Z_{bi} = F_0^{-1}(\gamma_i), \quad (8.17)$$

где $\gamma_i = F_0(t_i)$.

Для простейшего потока заявок $Z_{bi} = -\frac{\ln(1-\gamma_i)}{\lambda}$ или, поскольку инвертированная последовательность $1-\gamma_i$ также является стандартной случайной величиной, $Z_{bi} = -\frac{\ln\gamma_i}{\lambda}$.

Время обслуживания является случайной величиной: $\tau_{oi} = F_0^{-1}(\gamma_i)$. Время обслуживания линии k :

$$\tau_{oi} = -\frac{\ln\gamma_i}{\beta}, \quad (8.18)$$

где $\beta = 1/\bar{t}_{ог}$ – интенсивность потока обслуживания, $\bar{t}_{ог}$ – среднее время обслуживания.

Построим временную диаграмму процесса обслуживания на примере системы из $U = 3$ линий.

На оси O покажем моменты поступления заявок. На оси 1, 2, 3 толстой чертой отметим время занятости той или иной линии. Заявки, получившие отказ, покажем на 4-ой оси.

Итак, в момент 0 все линии свободны, и в систему поступает первая заявка. Она занимает 1-ю линию, если обслуживание линий упорядоченное. В случае случайного обслуживания необходимо разыграть, какая линия из свободных будет обслуживаться первой. Время обслуживания первой линии определяется по формуле:

$$\tau_{o1} = -\frac{\ln\gamma_1}{\beta}, \quad (8.19)$$

Вторая заявка поступит в систему через временной интервал z_1 , который определяется соотношением:

$$z_1 = -\frac{\ln \gamma_1}{\lambda}, \quad (8.20)$$

где $\lambda / \beta = \lambda \bar{t}_{ог}$ – загруженность линии.

При упорядоченном поиске 2-ая заявка занимает вторую линию. Время обслуживания этой заявки с помощью датчика случайных чисел определяется по формуле:

$$\tau_{o2} = -\frac{\ln \gamma_2}{\beta}.$$

Третья заявка поступит в систему в момент времени: $t = z_1 + z_2$, z_2 определяется с помощью датчика случайных чисел:

$$z_2 = -\frac{\ln \gamma_2}{\lambda}.$$

Далее процедуры повторяются для следующих заявок.

Вероятность отказов определяется как отношение числа заявок, получивших отказ, к общему числу поступивших заявок.

Такой процесс моделирования называется пособытийным моделированием.

9. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ЭПИДЕМИОЛОГИЯ: ПРИНЦИПЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Эпидемиология изучает распространение инфекций в (больших) популяциях индивидов-хозяев.

Модели популяционного уровня строятся на основе знания о взаимодействии отдельного индивида с инфекцией и с другими индивидами.

9.1. SIR модель

Стандартная “модель индивида” относительно инфекции – конечный автомат:

- S – чувствительные, неинфицированные,
- I – инфицированные = больные = инфекционные,
- R – излечившиеся = иммунные.

На базе “модели индивида” обычно строится “глобальная” модель, разделяющая популяцию на группы, соответствующие состояниям конечного автомата.

Возможны агентные модели, в которых каждый агент – это индивид, описываемый конечно-автоматной моделью.

Принцип формирования системы уравнений SIR модели напоминает подход к формированию системы уравнений для систем массового обслуживания. На рис. 9.1 представлена система состояний.

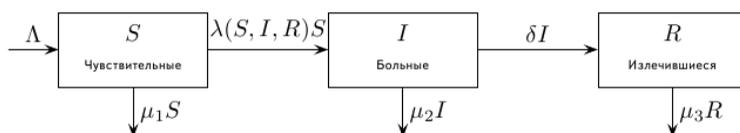


Рис. 9.1. Система состояний и переходов SIR модели

На основе схемы на рис. 9.1 формируем систему уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= \Lambda - [\lambda(S, I, R) + \mu_1]S, \\ \frac{dI}{dt} &= \lambda(S, I, R)S - (\delta + \mu_1)I, \\ \frac{dR}{dt} &= \delta I - \mu_3 R, \\ \lambda &= \beta I.\end{aligned}\tag{9.1}$$

Количество уравнений невелико и необходимости в имитационном моделировании нет. Из системы уравнений (9.1) мы получаем точное решение, при условии, что нам известны интенсивности переходов между состояниями.

9.2. Упрощение SIR-модели

В отсутствии иммунитета к болезни SIR модель упрощается до двух состояний и превращается в SI модель (рис. 9.2).

Соответственно получается более простая система уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= \Lambda - [\lambda(S, I, R) + \mu_1]S + \delta I, \\ \frac{dI}{dt} &= \lambda(S, I, R)S - (\delta + \mu_1)I, \\ \lambda &= \beta I.\end{aligned}\tag{9.2}$$

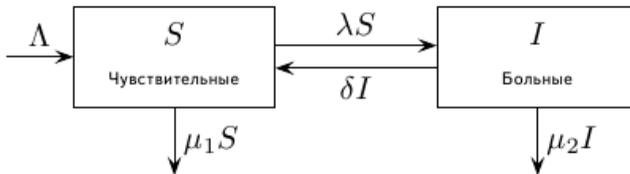


Рис. 9.2. Диаграмма состояний SI модели

9.3. Усложнение SIR модели

Естественно, что моделирование реальных эпидемий подразумевает использование существенно более сложных моделей. Но все эти сложные модели можно рассматривать как усложнение SIR модели.

На рис. 9.3 представлена схема модели эпидемии, в которой присутствуют носители латентной инфекции.

Система дифференциальных уравнений также становится сложнее:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \Lambda - [\lambda(S, I, R) + \mu_1]S + \gamma R, \\ \frac{dL}{dt} &= \lambda(S, I, R)S - (\sigma + \mu_L)L, \\ \frac{dI}{dt} &= \sigma L - (\delta + \mu_2)I + \psi(S, I, R)R, \\ \frac{dR}{dt} &= \delta I - [\mu_3 + \gamma + \psi(S, I, R)]R, \\ \lambda &= \beta I. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Модели “SIR-класса” применимы в основном для следующих исследований.

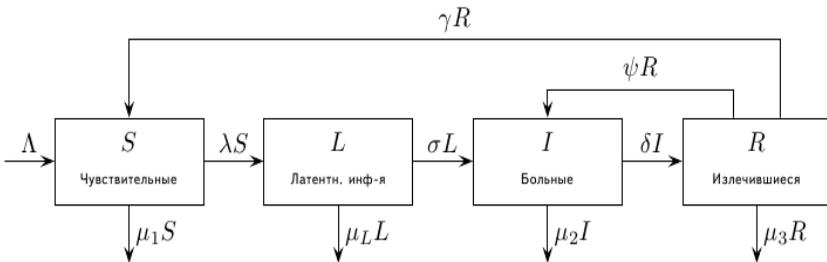


Рис. 9.3. Схема состояний и переходов с носителями латентной инфекции

- Эпидемиология “простых” инфекций, не дающих сложной картины заболевания.
- “Простые” демографические ситуации – отсутствие сложных эффектов роста и перераспределения популяции хозяев.
- Большие популяции – отсутствие стохастических эффектов.
- Однородные популяции – схожесть индивидов.
- В качестве примеров таких инфекций можно привести:
 - острые массовые инфекции: корь, краснуха, грипп/ОРВИ;
 - эпидемии компьютерных вирусов.

10. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

10.1. Виды моделей

Типичная термодинамическая система состоит из большого числа взаимодействующих частиц. Как, исходя из известных межмолекулярных взаимодействий, построить модель наблюдаемой сложной многочастичной системы? Самый очевидный подход – решить эту задачу в лоб, моделируя на компьютере саму задачу многих частиц. Этот подход называется молекулярной динамикой. Он был применен к небольшим системам многих частиц, которые насчитывали от нескольких сотен до нескольких тысяч частиц.

Однако детальное знание траектории всех частиц, входящих в термодинамическую систему, ничего не дает, если мы не знаем, какие вопросы требуют выяснения.

Различные виды моделей по возрастанию сложности:

- 1) модели газов;
- 2) модели кристаллических решеток (твердое тело);
- 3) модели жидкостей;
- 4) модели гетерогенных сред.

Далее мы будем рассматривать только модели газов.

10.2. Метод молекулярной динамики

Рассмотрим один из способов прямого моделирования.

Динамика считается классической, а молекулы химически инертными шариками. Будем предполагать, что сила взаимодействия любых двух молекул зависит только от расстояния между ними. В этом случае полная потенциальная энергия определяется суммой двухчастичных взаимодействий:

$$U = \sum_{i < j=1}^N V(r_{ij}), \quad (10.1)$$

где $V(r_{ij})$ зависит только от абсолютной величины расстояния r_{ij} между частицами i и j . В принципе, форму $V(r)$ для электрически нейтральных атомов можно построить путем детального расчета, который базируется на основных законах квантовой механики. Такой расчет очень труден, и бывает вполне достаточно использовать в качестве $V(r)$ простую феноменологическую формулу. Одной из самых употребительных феноменологических формул для $V(r)$ является потенциал Леннарда-Джона:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (10.2)$$

Зависимость r^{-6} получена теоретически, зависимость r^{-12} выбрана лишь из соображений удобства.

Устойчивость численного решения системы уравнений Ньютона можно проконтролировать, следя за полной энергией и убеждаясь, что она не ушла от своего первоначального значения. Чаще всего в моделях молекулярной динамики используется разностная схема Верле в скоростной форме:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n \Delta t^2,$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_{n+1} + a_n) \Delta t.$$

Для упрощения разностная схема записана только для одной компоненты движения частицы.

10.3. Измерение макроскопических величин в моделях молекулярной динамики

Для анализа макроскопического состояния термодинамических систем используются следующие соотношения.

$$\frac{3}{2}NkT = \sum \frac{1}{2} \langle mv_i^2 \rangle - \text{динамическое определение температуры.}$$

Сумма берется по всем частицам системы. Скобки $\langle \rangle$ – означают усреднение по времени. Это выражение – пример связи макроскопической величины с временным средним по траекториям частиц. Ещё одной характеристикой является теплоёмкость при постоянном объёме $C_v = \frac{\partial E}{\partial T}$, где E – полная энергия. Удобно определить

удельную теплоёмкость на частицу $c_v = \frac{C_v}{N}$. Легче всего получить

c_v путём нахождения средней потенциальной энергии при соседних температурах T и $T + \Delta T$, c_v складывается из температурной зависимости потенциальной энергии и удельной теплоёмкости связанной с кинетической энергией $3/2k$. Время счета пропорционально N^2 . Данная зависимость обусловлена тем, что вычисление энергии и сил требует суммирования по всем параметрам N взаимодействующих частиц. Однако, если взаимодействие является короткодействующим, то время для подсчета этих сумм, можно уменьшить до величины порядка N . Идея заключается в использовании того факта, что в любой данный момент времени большинство пар частиц разделяет расстояние гораздо большее, чем эффективный радиус межчастичного потенциала. Весь объём разбивается на ряд маленьких ячеек. На каждом шаге по времени составляется список молекул попавших в каждую ячейку. Моделирование молекулярной динамики позволяет получать результаты для систем частиц числом до 10^4 .

Для моделирования систем с большим числом частиц строится модель, использующая методы статистической механики.

10.4. Микроканонический ансамбль

Рассмотрим сначала замкнутую систему, у которой число частиц N , объём V и полная энергия E фиксированы. Предположим, что система изолирована. В общем случае замкнутая макроскопическая система стремится перейти в стационарное равновесное состояние с максимальной энтропией. Макросостояние системы характеризуется величинами N , V и E . На микроскопическом уровне существует в общем случае громадное число различных способов, иначе говоря, конфигураций, в которых может реализовываться данное макросостояние (N, V, E) . У нас нет никаких причин предпочесть одно из микросостояний другому, можно постулировать, что в любой данный момент времени система с равной вероятностью может оказаться в любом из своих микросостояний.

Пусть в системе всего Ω достижимых состояний. Вероятность найти систему в микросостоянии s равна: $P_s = \Omega^{-1}$, если s достижимо и $P_s = 0$ – в противном случае. Сумма P_s по всем Ω равна 1. Средние значения физических величин можно определить двумя способами. Можно усреднять по времени. Но можно вместо проведения измерений на одной системе можно использовать совокупность или ансамбль. Количество систем в ансамбле равно числу возможных микросостояний. Предположим, что некоторая физическая величина A имеет значение A_s , когда система находится в состоянии s . Тогда среднее от A по ансамблю: $\langle A \rangle = \sum_s A_s P_s$. Поскольку приведенные рассуждения о временных средних по ансамблю остаются все же формальными, рассмотрим простой пример. Рассмотрим модель, в которой частицы различимы, не взаи-

модействуют и могут иметь только две скорости v_0 и $-v_0$. Поскольку частицы не взаимодействуют, размер системы и положение частиц не имеет значения. Построим ансамбль систем, соответствующий $N = 4$ и $E = 2v_0^2$. Масса частиц считается равной 1.

Таблица 10.1. Ансамбль систем

$\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow$	$\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rightarrow$	$\leftarrow\leftarrow\rightarrow\rightarrow$	$\leftarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow$	$\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow$
	$\leftarrow\leftarrow\rightarrow\leftarrow$	$\leftarrow\rightarrow\leftarrow\rightarrow$	$\rightarrow\leftarrow\rightarrow\rightarrow$	
	$\leftarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow$	$\leftarrow\rightarrow\rightarrow\leftarrow$	$\rightarrow\rightarrow\leftarrow\rightarrow$	
	$\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow$	$\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rightarrow$	$\rightarrow\rightarrow\rightarrow\leftarrow$	
		$\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow$	$\rightarrow\rightarrow\rightarrow\leftarrow$	
		$\rightarrow\leftarrow\rightarrow\leftarrow$		
		$\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow$		

Перебор всех 16 систем ансамбля позволяет нам вычислить для физических величин системы средние по ансамблю. Из таблицы видно, что P_n – вероятность того, что число частиц, движущихся вправо, равно n , составляет 1/16; 4/16; 6/16; 4/16; 1/16 для $n = 0, 1, 2, 3, 4$, соответственно. Тогда среднее от n по ансамблю:

$$\langle n \rangle = \sum n P_n = (0 \cdot 1 + 1 \cdot 4 + 2 \cdot 6 + 3 \cdot 4 + 4 \cdot 1) / 16 = 2.$$

Итак, как же можно выполнить усреднение по ансамблю при заданных N , V и E ? Одним из способов является перебор все микросостояний и вычисление средних по ансамблю. Однако такой подход непрактичен, поскольку даже для небольшой системы число микросостояний очень велико. Желательно разработать практический метод получения репрезентативной выборки из полного числа микросостояний. Очевидная процедура – это зафиксировать N и V , изменить случайным образом координаты и скорости отдельных частиц и принять конфигурацию, если она имеет требуемую полную энергию. Данная процедура, однако, тоже весьма неэффективна, поскольку большинство конфигураций не будут иметь требуемую полную энергию и должны быть отвергнуты.

Была разработана эффективная процедура Монте-Карло. Представим себе макроскопическую систему, которая составлена из двух подсистем, а именно из исходной рассматриваемой системы, называемой далее системой, и подсистемы, состоящей из одного элемента. В силу исторических причин эта дополнительная степень свободы называется демон. Демон путешествует по системе и переносит энергию, когда пытается изменить динамические переменные системы. Если демон хранит достаточно энергии, чтобы произвести требуемое изменение, он отдает энергию любому элементу системы. Наоборот, если требуемое изменение уменьшает энергию системы, то избыточная энергия отдается демону. Единственное ограничение состоит в том, что энергия демона не может быть отрицательной. В итоге алгоритм принимает следующий вид.

1. Выбираем случайным образом частицу и производим пробное изменение её координат.

2. Вычисляем изменение энергии системы, обусловленное изменением координат.

3. Если пробное изменение уменьшает энергию системы, то система отдает энергию демону, и новая конфигурация принимается.

4. Если пробное изменение увеличивает энергию системы, то новая конфигурация принимается в том случае, если демон имеет достаточную энергию, чтобы передать её системе. В противном случае новая конфигурация отбрасывается, и частица сохраняет свои старые координаты.

5. Если пробная конфигурация не меняет энергию системы, новая конфигурация принимается.

Указанная процедура повторяется до тех пор, пока не будет получена репрезентативная выборка состояний. Через определенный промежуток времени, демон и система достигнут равновесия на какой-то средней для каждого энергии.

Полная энергия остается постоянной, и поскольку демон представляет только одну степень свободы по сравнению со многими степенями свободы системы, можно предположить, что флуктуации энергии системы будут малы. Откуда следует, что результат моделирования микроканонического ансамбля методами Монте-Карло и усреднения по времени в молекулярной динамике одинаковы. Предположение, что оба усреднения дают одинаковые результаты, называют эргодинамической гипотезой. Хотя в общем случае нельзя показать, что они идентичны, найдено, что во всех практически интересных случаях они дают одинаковые результаты.

10.5. Модель Изинга

Рассмотрим в качестве практического примера модель Изинга. Рассмотрим решетку, содержащую N узлов, и предположим, что с каждым узлом решетки i связано число s_i , где $s_i = +1$, если спин ориентирован вверх и $s_i = -1$, если он ориентирован вниз. Любая конкретная конфигурация, то есть микросостояние решетки, задается набором переменных (s_1, s_2, \dots, s_N) для всех узлов решетки.

Макроскопические свойства системы определяются свойствами её достижимых микросостояний. Следовательно, необходимо знать зависимость энергии E от конфигурации спинов. Полная энергия при наличии магнитного поля h в модели Изинга

$$E = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (10.3)$$

первая сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов, а вторая сумма по всем спином решетки. Константа обменного взаимодействия J является мерой силы взаимодействия.

Если $J > 0$, то состояния $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ с одинаковой ориентацией спинов ближайших соседей энергетически выгоднее по сравнению с состояниями $\uparrow\downarrow$ и $\downarrow\uparrow$.

Следовательно, можно ожидать, что для $J > 0$ состояние с наименьшей энергией является ферромагнитным, то есть в среднем суммарное число спинов, ориентированных в одном направлении не равно 0. Если $J < 0$, то предпочтительнее состояния $\uparrow\downarrow$ и $\downarrow\uparrow$, и состояние с наименьшей энергией является антиферромагнитным.

В модели Изинга пренебрегается кинетической энергией атомов, связанных с узлами решетки, в энергии взаимодействия учитывается вклад только ближайших соседей, и предусматривается только два дискретных состояния для спинов.

В модели Изинга зависимость энергии от спиновой конфигурации недостаточна для определения временных свойств системы. Иными словами соотношение (10.3) не характеризует изменение системы при изменении спиновой конфигурации, и приходится вводить динамику отдельно. Наибольшее распространение для спиновых моделей Изинга получила динамика опрокидывания спина. В этой динамике спин выбирается случайным образом, и пробное изменение соответствует опрокидыванию спина.

Рассмотрим теперь алгоритм моделирования. В одномерной модели Изинга демон должен выбирать спины случайно, чтобы не попадать на периодически повторяющиеся конфигурации. Поскольку нас интересуют свойства бесконечной системы, нужно учесть краевые условия. В качестве простейшего краевого условия обычно выбирается «свободная граница», это означает, что спины в узлах 1 и N взаимодействуют только с одним ближайшим соседом.

Чему равны некоторые средние величины, которые желательно вычислить? Очевидной величиной является суммарный магнитный момент, или намагниченность M , определяемый формулой

$$M = \sum_{i=1}^N s_i.$$

10.6. Канонический ансамбль

Большинство физических систем являются изолированными и обмениваются энергией с окружающей средой. Будем считать, что любое изменение энергии малой системы не влияет заметным образом на температуру T большой системы. Представим себе бесконечно большое количество копий системы и теплового резервуара. Вероятность того, что система находится в микросостоянии s с энергией E_s , описывается формулой

$$P_s = \frac{1}{z} \exp(-\beta E_s),$$

где z – нормировка, $\beta = (kT)^{-1}$, k – постоянная Больцмана. Ансамбль, определяемый этим выражением, называется каноническим.

Поскольку $\sum P_s = 1$, то z находится как:

$$z = \sum_{s=1}^M \exp(-\beta E_s).$$

Сумма берется по всем M микросостояниям системы. С помощью формулы можно получить среднее по ансамблю от рассматриваемых физических величин. Например, средняя энергия равна

$$\langle E \rangle = \sum_s E_s P_s = \frac{1}{z} \sum_s E_s \exp(-\beta E_s).$$

10.7. Алгоритм Метрополиса

Как промоделировать систему, состоящую из N частиц, находящихся в объеме V при постоянной температуре T ? Поскольку мы умеем генерировать только ограниченное число m из полного числа M конфигураций, то можно получить оценку среднего значения $\langle A \rangle$ из выражений

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_s^M A_s \exp(-\beta E_s)}{\sum_s^M \exp(-\beta E_s)} \approx \frac{\sum_s^m A_s \exp(-\beta E_s)}{\sum_s^m \exp(-\beta E_s)},$$

где E_s и A_s обозначают полную энергию и значение физической величины A в конфигурации s , соответственно. На основе простейшей процедуры Монте-Карло генерируется случайная конфигурация, и подсчитывается вклад этой конфигурации в сумму.

Однако каждая такая конфигурация очень маловероятна и поэтому дает малый вклад в сумму. Вместо этого нужно пользоваться методом существенной выборки и генерировать конфигурации в соответствии с функцией распределения вероятностей P_s . Поскольку усреднение будет проводиться по m конфигурациям смещенной выборки, для исключения этого смещения должны взвешивать каждую конфигурацию с множителем $1/P_s$:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_s^m A_s \frac{1}{P_s} \exp(-\beta E_s)}{\sum_s^m \frac{1}{P_s} \exp(-\beta E_s)}.$$

В качестве P_s целесообразно выбрать распределение Больцмана:

$$P_s = \frac{\exp(-\beta E_s)}{\sum_s \exp(-\beta E_s)}.$$

Сформулируем общую форму алгоритма:

1. Формируем начальную конфигурацию.
2. Производим случайные пробные изменения в начальной конфигурации.
3. Вычисляем ΔE , обусловленное изменением конфигурации.

4. Если $\Delta E \leq 0$, то принимаем новую конфигурацию и переходим к шагу 8.
5. Если $\Delta E > 0$, то вычисляем вероятность перехода $W = \exp(-\beta\Delta E)$.
6. Генерируем случайное число r в интервале $(0, 1)$.
7. Если $r \leq W$, то новую конфигурацию принимаем, в противном случае сохраняем текущую.
8. Определяем значения требуемых физических величин.
9. Повторяем шаги 1-8 для получения достаточного количества конфигураций.

11. МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

11.1. Обзор квантовой теории

Для квантовых систем нельзя пользоваться методами молекулярной динамики, так как координата и импульс не могут быть точно определены одновременно. Поскольку фундаментальное описание природы по сути является квантовомеханическим, то возникает проблема, которая заключается в том, что невозможно в конечном счете промоделировать природу на компьютере.

Однако квантовая механика позволяет нам анализировать вероятности. Для понимания трудностей, связанных с таким анализом, рассмотрим сначала простую вероятностную систему, описываемую одномерным уравнением диффузии:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}, \quad (11.1)$$

где $P(x,t)$ – плотность вероятности того, что в момент времени t частица находится в точке с координатами x .

Для вычисления $P(x,t)$ размер сетки выбирается так, чтобы знать m значений функций, то есть для каждого значения t требуется m точек.

По сравнению с этим подходом для метода молекулярной динамики требуется всего одна точка. Трудоемкость метода вычисления становится ещё более очевидной, если система имеет много степеней свободы. Например, если имеется N частичная одномерная система, то нам нужно вычислять вероятность $P(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)$, где x_i – координата i -ой частицы. Поскольку для каждой x_i необходимо выбрать m -точечную сетку, то в каждый момент времени нужно определять N^m конфигураций.

Для простоты рассмотрим одномерные нерелятивистские квантовые системы, состоящие из одной частицы.

Состояние системы полностью описывается волновой функцией $\Psi(x, t)$, которая интерпретируется как амплитуда вероятности. $P(x, t)\delta x$ – вероятность того, что частица находится в элементе δx с центром в точке x в момент времени t равна:

$$P(x, t)\delta x = C |\Psi(x, t)|^2 \delta x, \quad (11.2)$$

где C – нормировочная константа.

Удобно использовать нормированные волновые функции $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)\delta x = 1$. Где $\Psi^*(x, t)$ – функция комплексного сопряжения $\Psi(x, t)$, тогда $C = 1$.

Если частица движется в потенциале $V(x, t)$, то временная эволюция функции $\Psi(x, t)$ описывается стационарным уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - V(x, t)\Psi(x, t), \quad (11.3)$$

где m – масса частицы, \hbar – постоянная Планка, поделённая на 2π .

Любая физическая величина представляется оператором. Среднее значение наблюдаемой величины A определяется выражением:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(x, t) A_{\text{op}} \Psi(x, t) \delta x,$$

где A_{op} – оператор, соответствующий величине A . Например, оператор, соответствующий импульсу p , имеет вид: $p_{\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Если

потенциал не зависит от времени, то для уравнения можно получить решение вида:

$$\Psi(x, t) = \Phi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right).$$

Частица, находящаяся в этом состоянии, имеет вполне конкретное значение энергии E . Если подставить выражение в уравнение Шредингера, получим стационарное уравнение Шредингера.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \Phi(x) = E_n \Phi(x), \quad (11.4)$$

где $\Phi(x)$ – собственная функция оператора Гамильтона

$$H_{op} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (11.5)$$

соответствующая собственному значению E , то есть $H_{op} \Phi(x) = E_n \Phi_n(x)$. Общее решение можно записать в виде суперпозиций собственных функций:

$$\Psi(x, t) = \sum c_n \Phi_n(x) \exp\left(-\frac{Et}{\hbar}\right).$$

11.2. Стационарное уравнение Шредингера

Поскольку стационарное уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением второго порядка, то для получения единственного решения, необходимо задать два краевых условия. Для упрощения анализа рассмотрим симметричные потенциалы, удовлетворяющие условию $V(x) = V(-x)$.

Для уравнения (11.4) с $V(x) = 0$ можно представить комбинации синусов и косинусов.

Колебательный характер этого решения позволяет надеяться, что алгоритм Эйлера-Кромера будет давать удовлетворительные результаты и в случае $V(x) \neq 0$.

Алгоритм решения следующий.

1. Разбиваем область измерения x на N отрезков длиной Δx .
Даём определения: $x_r = r\Delta x$, $\Phi_r = \Phi(x_r)$ и $\Phi'_r = \Phi'(-x')$.
2. Задаем четность функции $\Phi(x)$. Для четного решения выбираем $\Phi(0) = 1$ и $\Phi'(0) = 0$.
3. Задаем начальные приближения для E .
4. Вычисляем Φ'_{r+1} и Φ_{r+1} :

$$\Phi'_{r+1} = \Phi_r + \Phi''_r \Delta x,$$

$$\Phi_{r+1} = \Phi_r + \Phi'_r \Delta x.$$

5. Проводим итерации $\Phi(x)$ по возрастанию x до тех пор, пока $\Phi(x)$ не начнет расходиться.

6. Изменяем величину E и повторяем шаги 2–4. Изменяем значение E до тех пор, пока при значении E , немного меньшем текущего, не будет расходиться в одном направлении, а при немного большем – в другом.

11.3. Нестационарное уравнение Шредингера

Решить нестационарное уравнение Шредингера гораздо сложнее. Самый простой метод – введение ещё одной сетки по временной координате:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} [\Psi_r(n+1) - \Psi_r(n)] = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2} [\Psi_{r+1}(n) - 2\Psi_r(n)] + \Psi_{r-1}(n). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Это явная схема. К сожалению, этот явный метод приводит к неустойчивым решениям. Один из способов этого избежать состоит в том, чтобы, не меняя формулу схемы, вычислять производную по координате в правой части в момент времени t_{n+1} , а не t_n :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} [\Psi_r(n+1) - \Psi_r(n)] = \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi_{r+1}(n+1) - 2\Psi_r(n+1)] + \Psi_{r-1}(n+1) \end{aligned} \quad (11.7)$$

Это неявная схема, так как неизвестная функция $\Psi_r(n+1)$ входит в обе части уравнения (11.7). Вместо данного прямого численного метода предположим, что нам уже известны собственные функции и собственные значения стационарного уравнения Шредингера. Подход заключается в том, чтобы построить зависимость от времени, используя эти собственные функции и собственные значения.

Известно, что если $V(x)$ не зависит от времени, то можно выразить произвольное решение в виде:

$$\Psi(x, t) = \sum c_n \Psi_n(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right)$$

11.4. Анализ квантовых систем с помощью метода случайных блужданий

Нестационарное уравнение Шредингера параболическое, следовательно, для его решения может использоваться метод случайных блужданий при его минимальном преобразовании. Произведем в нестационарном уравнении Шредингера для свободной

частицы замену $\tau = \frac{it}{\hbar}$ и получим

$$\frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2}.$$

Это уравнение совпадает по форме с уравнением диффузии, и волновую функцию можно интерпретировать как плотность вероятности диффузионного процесса с коэффициентом диффузии $O = \hbar^2 / 2m$. Поэтому, непосредственное решение уравнения Шредингера можно заменить решением эквивалентной задачи о случайном блуждании. Так как уравнение Шредингера линейно, можно представить себе множество «частиц», которые движутся независимо друг от друга. Перепишем уравнение Шредингера в следующей форме:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2} - V(x) \Psi(x).$$

Если бы компонента $\nabla \Psi$ отсутствовала, то это уравнение было бы обычным уравнением диффузии.

С другой стороны, если бы в правой части был только один член $\nabla \Psi$, то уравнение можно было бы понимать как кинетическое уравнение, описывающее ветвящиеся процессы.

Следовательно, это уравнение можно трактовать как комбинацию диффузного и ветвящегося процессов, в которых число «частиц» уменьшается в точке x в зависимости от знака функции $V(x)$. Общее решение уравнения Шредингера можно записать в виде:

$$\Psi(x, \tau) = \sum c_n \Phi(x) \exp(-E_n \tau),$$

где c_n – коэффициенты разложения по спектру энергий E_n .

12. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Моделирование геометрических фазовых переходов может имитировать физические фазовые переходы, но при этом не требуется обширных знаний физики.

12.1. Геометрические фазовые переходы

Представим себе большую шахматную доску. Будем представлять эту шахматную доску как квадратную решетку и предположим, что каждый квадрат или ячейка этой решетки может находиться в двух состояниях: «занято» или «пусто». Каждая клетка занимается с вероятностью p независимо от состояния соседних ячеек. Эта модель называется ячеечной перколяцией. Занятые ячейки либо изолированы друг от друга, либо образуют группы, состоящие из ближайших соседей.

Кластер – это группа занятых ячеек решетки, связанных с ближайшим соседом по стороне ячейки.

Две занятые ячейки принадлежат одному кластеру, если они соединены путем, состоящим из занятых ячеек. Обычно генератором случайных чисел генерируется случайное число, ячейка занимает, если оно меньше некоторого значения p . Если вероятность занятия ячейки мала, то можно ожидать, что будут присутствовать только небольшие изолированные кластеры. Если $p \sim 1$, то ожидается, что большинство занятых ячеек образует один большой кластер, который протянется от одной стороны решетки до другой. Этот кластер называют соединяющим кластером.

В пределе бесконечной решетки существует вполне определенная «пороговая» вероятность p_c , такая, что для $p \geq p_c$ существует один соединяющий кластер, для $p < p_c$ нет ни одного соединяющего кластера, и все кластеры конечны.

Характерной особенностью присущей перколяции, является связность. Поскольку связность обнаруживает качественное изменение при конкретном значении некоторого параметра, который можно менять непрерывно, то переход из состояния, не содержащего соединяющий кластер, в состояние с одним соединяющим кластером представляет собой фазовый переход. Примером приложения понятий перколяции является электропроводность сложных систем, состоящих из проводящих и непроводящих материалов. Простой пример изготовления такой системы в лабораторных условиях заключается в помещении в контейнер смеси маленьких металлических и пластмассовых шариков. Шарика должны быть случайно распределены по объёму. Если металлические шарика составляют малую долю объёма системы, то электрический ток не может пройти через комбинированную систему, и она будет изолятором. Однако, если металлические шарика составляют большую часть объёма контейнера, то электрический ток будет в состоянии протекать через области, занимаемые этими шариками, и система будет проводником. Описание протекания электрического тока через комбинированные материалы можно сделать более точным, вводя параметр ϕ – долю объёма контейнера, занимаемую металлическими шариками.

Также явления перколяции находят приложения в моделировании распространения эпидемий в популяции, поведения магнитов, содержащих примеси, и гелей.

Для конечной решетки со стороной L , которую можно промоделировать на компьютере, всегда существует ненулевая вероятность того, что будет появляться соединяющий кластер. Для малых значений p эта вероятность пропорциональна p^L . «Пороговая» вероятность $p_c(L)$ определяется как среднее значение, при котором впервые появляется соединяющий кластер.

При обсуждении перколяции мы подчеркнули, что существует порог перколяции p_c , и появляется соединяющий путь или кластер при $p \geq p_c$. Более полную информацию даёт распределение размеров кластеров $n_s(p)$, определяемое формулой

$$n_s(p) = \frac{\langle N_s \rangle}{L^2},$$

где $\langle N_s \rangle$ – среднее число кластеров размера s , L^2 – полное число ячеек. Традиционно под размером кластера подразумевается число ячеек в кластере, а не его пространственная протяженность.

Поскольку $\sum_s sn_s$ представляет концентрацию занятых ячеек, а sn_s – концентрацию занятых ячеек кластерами размером s , величина

$$\omega_s = \frac{sn_s}{\sum_s sn_s}$$

является вероятностью того, что занятый узел, выбранный случайным образом, принадлежит кластеру размером s . Следовательно, средний размер кластера S определяется как

$$S = \sum_s s\omega_s = \frac{\sum_s s^2 n_s}{\sum_s sn_s}. \quad (12.1)$$

Другой величиной, характеризующей перколяцию, является $P_\infty(p)$ – вероятность того, что занятая ячейка принадлежит соединяющему кластеру:

$$P_\infty(p) = \frac{N_\infty}{N_p},$$

где N_∞ – число ячеек в соединяющем кластере, N_p – полное число занятых ячеек. В случае бесконечной решетки $P_\infty(p) = 0$ при $p < p_c$ и $P_\infty(1) = 1$.

Из повседневного опыта нам известны различные фазовые состояния вещества. Изменение фаз представляет собой пример термодинамического фазового перехода. Для большинства веществ существует критическая точка, то есть при давлении и температуре выше конкретных значений температуры и давления невозможно различить газовую и жидкую фазу.

Другим важным, но менее известным примером является существование критической точки в магнетиках при температуре Кюри. Известно, что при низких температурах некоторые тела ведут себя как ферромагнетики. Если повышать температуру, спонтанная намагниченность непрерывно убывает, обращаясь в нуль при критической температуре T_c . При $T > T_c$ система становится парамагнетиком.

Конечно, перколяция не является фазовым переходом в обычном смысле, поскольку для её описания не требуется температура. Но свойства геометрических фазовых переходов в задачах перколяции и термодинамических фазовых переходов качественно подобны. Для описания кластеров вводится величина $\xi(p)$ – средняя длина связности или характерный линейный размер. В качестве одного из определений длины связности рассматриваем присваивание ей значения радиуса циркуляции наибольшего кластера, состоящего из s ячеек, где радиус циркуляции рассчитывается как

$$R_s^2 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s (\vec{r}_i - \langle \vec{r} \rangle)^2,$$

где $\langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \vec{r}_i$ и \vec{r}_i – координата i -ой ячейки в этом кластере. Величина $\langle \vec{r} \rangle$ является аналогом радиус-вектора центра масс кластера.

Для больших значений L $\xi(p)$ – убывающая функция в диапазоне $p > p_c$ и возрастающая для $p < p_c$. Кроме того, $\xi(p = p_c) \cong L$ и, следовательно, является расходящейся при $L \rightarrow \infty$. Качественное поведение функции ξ не зависит от определения этой функции. По мере приближения p к p_c возрастает вероятность того, что два занятых узла находятся в одном кластере. Очевидно, что в пределе $L \rightarrow \infty$ $\xi(p)$ сингулярна в критической области $|p - p_c| \ll 1$. Количественно можно описать сингулярность, вводя критический показатель степени ν , определяемый соотношением $\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}$.

Как ведут себя в критической области другие величины, которые были введены ранее? Можно предположить, что рост P_∞ в критической области пропорционален степенной функции $P_\infty \sim (p_c - p)^\beta$.

В терминологии критических явлений P_∞ называется параметром порядка системы. Критический показатель степени β описывает стремление к нулю связности бесконечного кластера при пороговом значении для перколяции.

Другой рассматриваемой величиной является средний размер кластера $S(p)$. Критическое поведение $S(p)$ можно описать следующим выражением:

$$S(p) \sim (p - p_c)^{-\gamma}.$$

Для сравнения приведем в таблице 12.1 схожие критические показатели для перколяции и магнетиков.

Поскольку мы можем моделировать только конечные решетки, прямая подгонка измеряемых величин ξ , P_∞ и $S(p)$ по ранее указанным формулам не будет давать хорошие оценки для соответствующих показателей степени. Главная проблема заключается в том, что нельзя взять p достаточно близким к p_c без получения эффектов конечного размера. Для значений $p \ll p_c$ и $p \gg p_c$ свойства системы неотличимы от соответствующих свойств истинно макроскопической системы ($L \rightarrow \infty$). Однако, если значение p близко к p_c , то $\xi(p)$ сравнима с L , и поведение системы отличается от поведения макроскопической системы.

Если ξ сравнима с L , то для ξ применяется выражение

$$\xi(p) \sim L \sim |p - p_c|^{-\nu}.$$

Обращая это выражение, получим $|p - p_c| \sim L^{-1/\nu}$, и тогда можно заменить выражение для P_∞ на $P_\infty(p = p_c) \sim L^{-\beta/\nu}$ ($L \rightarrow \infty$).

С помощью этого соотношения можно определить критические показатели. Такой метод анализа известен как конечномерное масштабирование и является важным при изучении критических показателей. Если L достаточно велико, то можно воспользоваться этим соотношением для оценки отношения β/ν .

Таблица 12.1. Соответствие геометрических и физических фазовых переходов

	Зависимость	Показатель	$d = 2$	$d = 3$
Перколяция				
Параметр порядка	$P_\infty \sim (p_c - p)^\beta$	β	5/36	0,4
Средняя длина конечного кластера	$S(p) \sim (p - p_c)^{-\gamma}$	γ	43/18	1,8

Длина корреляции	$\xi(p) \sim p - p_c ^{-\nu}$	ν	4/3	0,9
Магнетизм				
Параметр порядка	$M(T) \sim (T - T_c)^\beta$	β	1/8	0,32
Восприимчивость	$\chi(T) \sim (T - T_c)^{-\gamma}$	γ	7/4	1,24
Длина корреляции	$\xi(T) \sim T - T_c ^{-\nu}$	ν	1	0,63

12.2. Ренорм-группы

Рассмотрим квадратную решетку, которая разбита на клетки или блоки. Эффект ренормализации заключается в замене каждой клетки единственным ренормированным узлом и перемасштабированием длины связности для ренормированной решетки в b раз.

Как установить, будут ли ренормированные узлы заняты или свободны? Будем считать, что ренормированный узел занят, если исходная группа узлов связывает эту клетку (то есть существует соединяющий кластер).

Реализация метода ренорм-группы распадается на две части: усреднение по всем основным переменным и точное определение параметров, определяющих ренормированную конфигурацию.

1. Группируется b^α ячеек внутри блока размером l и заменяется одной единственной ячейкой, которая изображается или нет в зависимости от наличия или отсутствия кластера.

2. Определяются параметры, которые характеризуют новую конфигурацию после усреднения.

Мы допустим, что каждая клетка независима от остальных и характеризуется только значением p' – вероятностью того, что клетка занята. Поскольку преобразование ренормализации, связывающее между собой p' и p , должно отражать тот факт, что основным свойством перколяции является связность, т.е. наличие

соединяющего пути, будем считать клетку занятой, если она содержит множество ячеек, которые «пересекают» эту клетку. Следовательно, если ячейки занимаются с вероятностью p , то клетки занимаются с вероятностью p' , где p' определяется рекурсивным соотношением $p' = R(p)$.

Функция $R(p)$ – полная вероятность того, что ячейки образуют соединяющий путь. Приведем пример для случая с $b = 2$. Вероятность того, что ренормированная ячейка будет занятой, равна сумме вероятностей всех возможных вариантов

$$p' = R(p) = p^4 + 4p^3(1-p) + 2p^2(1-p)^2. \quad (12.2)$$

Заметим, что вероятность занятия ренормированных ячеек p' отличается от вероятности занятия исходных ячеек p .

Допустим, если начинать преобразование со значения $p = p_0 = 0,5$, то $p_1 = R(p_0 = 0,5) = 0,44$, $p_2 = R(p_1) = 0,35$. Нетрудно сделать вывод, что дальнейшее применение преобразования будет приближать систему к неподвижной точке $p = 0$. Точно так же, начиная с $p = 0,7$, после последовательного применения преобразований попадем в неподвижную точку $p = 1$.

Для нахождения нетривиальных, устойчивых точек, соответствующих критическому порогу, необходимо найти некоторое p^* , удовлетворяющее соотношению $p^* = R(p^*)$.

Из соотношения (12.2) получим $p^* = 0$, $p^* = 1$ и $p^* = 0,61804$. Эту величину и свяжем с p_c . Для вычисления критического показателя ν вспомним, что на ренормированной решетке все длины уменьшаются в b раз. Следовательно, длина связности преобразу-

ется как $\xi' = \xi / b$. Так как $\xi(p) = \text{const} |p - p_c|^{-\nu}$ для $p \sim p_c$ и p_c соответствует p^* , то $|p' - p_c|^{-\nu} = b^{-1} |p - p^*|^{-\nu}$.

Разложим ренормализационное преобразование в ряд вблизи p^* и получим с точностью до членов второго порядка

$$p' - p^* = R(p^*) \cong \lambda(p - p^*),$$

$$\lambda = \left. \frac{\partial R}{\partial p} \right|_{p=p^*}.$$

Возведем в степень « $-\nu$ »: $|p^* - p_c|^{-\nu} = \lambda^{-\nu} (p - p^*)^{-\nu}$. Получим $b^{-1} = \lambda^{-\nu}$. Прологарифмируем обе части: $\nu = \frac{\log b}{\log \lambda}$.

После ренормализации теряются некоторые исходные соединяющие пути и формируются новые пути, отсутствующие в исходной решетке. Этот эффект становится менее вероятным с увеличением размера клеток. Можно улучшить значения $p_c(b)$ и $\nu(b)$ перебором соединяющих кластеров для достаточно больших значений b . Однако поскольку имеется 2^{b^2} возможных конфигураций, полный перебор невыполним для $b > 5$, и нужно использовать методы Монте-Карло.

12.3. Метод Монте-Карло для ренорм-группы

Запишем $R(p)$ в виде:

$$R(p) = \sum_{n=1}^N C_N^n p^n q^{(N-n)} S(n),$$

где $N = b^2$; C_N^n – число возможных комбинаций n занятых и $N - n$ пустых; $S(n)$ – вероятность того, что конфигурация с n занятыми

ячейками протекает через клетку. Для $b = 2$; $S(1) = 0$; $S(2) = 2/6$; $S(3) = 1$; $S(4) = 1$.

Алгоритм:

1. Частица произвольно добавляется в незанятый узел.
2. Проверка, существует ли соединяющий путь.
3. Если соединяющий путь существует после добавления s частиц, то $S(n) = S(n+1)$ для $n \geq S$.
4. После приемлемого числа испытаний $S(n)$ можно нормировать.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский, А.А., Михайлов, А.П., Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд. испр. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.
2. Гулд Я., Тобочник Х. Компьютерное моделирование в физике. В 2 ч. – М.: Мир, 1990.
3. А.Н. Коварцев. Имитационное моделирование систем массового обслуживания: метод. указания к лабораторным занятиям. – Самара, 2000. – 47с.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.

Учебное издание

*Скиданов Роман Васильевич
Нестеренко Дмитрий Владимирович*

**ВВЕДЕНИЕ В МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Учебное пособие

Редакционно-издательская обработка
издательства Самарского университета

Подписано в печать 22.04.2024. Формат 60x84 1/16.

Бумага офсетная. Печ. л. 7,5.

Тираж 120 экз. (1-й з-д 1-27). Заказ № . Арт. –2(Р1УП)/2024.

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

Издательство Самарского университета.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.