ВСТУП

Слово «модель» дуже поширене - і не тільки в науковій літературі, але і в науці, в засобах масової інформації і навіть в художніх творах. Однак в більшості випадків люди, які використовують цей термін, не зовсім чітко розуміють, що це таке. І це не дивно, так як відповідь на питання: «Що таке модель?» не такий простий. (Спробуйте зробити це самостійно, нікуди не заглядаючи.)

На жаль, численні визначення, наведені в літературі, «пропускають» багато важливих аспектів поняття моделі. У Вікіпедії, наприклад, даються такі визначення моделі:

«Модель - це спрощене уявлення реального пристрою і / або процесів і явищ, що відбуваються в ньому. Модель (техніка) - це спрощене уявлення реального об'єкта і (або) процесів, що відбуваються в ньому. Модель (наука) - це психічно спрощений об'єкт, який зберігає тільки найважливіші властивості реально існуючого об'єкта або системи, і призначений для їх вивчення. Модель (теорія моделей) - це теоретико-множинна структура, яка надає зміст формулам і твердженням формальної теорії.

Модель - це зменшена копія об'єкта." У книзі Г.Й. Різніченка (Лекції з математичних моделей в біології, Москва-Іжевськ, 2002), яка ближче за тематикою до даного курсу, пропонується наступне визначення: "модель - це копія об'єкта, в якомусь сенсі" більш зручна, що дозволяє маніпулювати в просторі і часі.

З цих визначень зрозуміло, що поняття моделі по-різному використовується в різних галузях знань, але незрозуміло, що це за модель «сама по собі», а також не зрозуміло, що собою являє згадана процедура «спрощення» і яким чином модель стає «зручніше» для дослідження. Спробуємо вибудувати концепцію моделі так, щоб ми могли з нею працювати.

Перш за все, давайте зафіксуємо два основних принципи. 6

1. Модель об'єкта (О1 на рис. 1) в свою чергу являє собою об'єкт (О2 на рис. 1), інший взагалі кажучи об'єкт, матеріальний (рідше) або символічний (найчастіше).

2. Незалежний об'єкт (О2) стає моделлю, коли ми ототожнюємо деякі його властивості (A', B', C' на рис.1) з деякими властивостями вихідного об'єкта (A, B, C на рис. 1).

ОБ'ЄКТ

 A, B, C D, E

 A', B', C' F, G

 МОДЕЛЬ

Малюнок 1. Модель (O2) об'єкта (O1). А, Б, З ... D, E - спостережувані властивості об'єкта, A', B', C' ... F, G - спостережувані властивості моделі. Існує відповідність між властивостями об'єкта A, B, C і властивостями моделі A', B', C'.

Давайте докладніше розглянемо, що випливає з цих принципів.

 Перш за все, необхідно чітко описати властивості, які виявлені в об'єкті і моделі, щоб уникнути непорозумінь. Так, наприклад, формула I = U/R НЕ Є ЗАКОНОМ ОМА ОМА (ЗНАКОВА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ СТРУМУ, ЩО ПРОТІКАЄ ЧЕРЕЗ РЕЗИСТОР) ПОКИ МИ НЕ ЗАФІКСУЄМО, ЩО ЗНАЧЕННЯ ЗМІННОЇ I ВІДОБРАЖАЄ ВЕЛИЧИНУ СТРУМУ ЧЕРЕЗ РЕЗИСТОР, ЗНАЧЕННЯ ЗМІННОЇ U ВІДОБРАЖАЄ НАПРУГУ НА РЕЗИСТОРІ, А O1 O2 A, B, C D, E A', B', C' F, G МОДЕЛЬНИЙ ОБ'ЄКТ 7 значення змінної R відображає опір резистора. Тому що, взагалі кажучи, ця формула також може бути використана для моделювання багатьох інших об'єктів, ну, принаймні, як другий закон Ньютона; звичайне буквальне вираз цього закону a = F / m - не що інше, як данина традиції, «роль» будь-яких букв не може бути встановлена раз і назавжди.

Крім того, оскільки сама модель є об'єктом, вона може володіти деякими власними властивостями (F і G на рисунку 1), які не мають відношення до моделювання. І тут криється небезпека однієї з найпоширеніших помилок при моделюванні - коли досліджуються ті властивості моделі, які не були ототожнені з властивостями об'єкта і, по суті, не мають нічого спільного з моделюванням (виходячи за межі застосовності моделі). На жаль, є навіть публікації в солідних журналах, де досліджуються саме ті властивості складних математичних моделей, які не мають відношення до модельованого об'єкта.

Також, не слід забувати, що НЕ ВСІ властивості об'єкта ототожнюються з властивостями моделі, практично завжди присутній набір властивостей об'єкта (D і E на рис. 1), який не відображений моделлю. І модель не може сказати НІЧОГО про цю сторону поведінки об'єкта.

**1.2. приклади моделей**

З вищесказаного видно, що модель не може виникнути випадково, моделювання - це завжди цілеспрямована дія. У моделюванні, тобто при виборі і формулюванні моделі, визначальними обставинами виступають об'єкт, метод (засоби), мета моделювання і сукупність модельованих властивостей об'єкта. Давайте спочатку розглянемо кілька простих прикладів.

1. Портрет. Нехай хтось замовить художнику написати чийсь портрет. Об'єктом моделювання в даному випадку виступає зображена людина. Метод (засоби) - фарби, пензлі, полотно. Емаль, якщо портрет виконаний на медальйоні, як це було прийнято в минулі століття. Камера і плівка. 8 Рекламний щит, якщо хтось хоче, щоб його даму бачили всі, хто проїжджає по жвавому шосе. Обкладинка журналу або екран телевізора. Нарешті, сам художник, фотограф або рекламне агентство в особі його дизайнерів. Метою в даному випадку є якась маніпуляція простором і часом. Вчасно зберегти зовнішній вигляд людини. Ще одна можлива мета - відтворити образ об'єкта, щоб зробити модель доступною для певного кола людей. Або повторіть його багато разів, якщо хтось хоче, щоб зображення побачили мільйони. Звичайно, моделюється в цьому випадку тільки зовнішній вигляд об'єкта. Портрет не дозволяє, наприклад, впевнено судити про характер або розум намальованого обличчя. З іншого боку, вицвітання або розтріскування фарб з часом не означає, що зображений був таким блідим або потрісканим.

2. Акваріум. В акваріумі можна імітувати водну екосистему - річку, озеро, море, заселяти його деякими видами фіто- і зоопланктону, риб, підтримувати певний склад води, температуру, рівні течії. І строго контролювати умови проведення експерименту. Які компоненти природної системи будуть відтворюватися і з якою точністю, залежить від мети моделювання.

3. Двошарова ліпідна мембрана. Ще більш «модельним» прикладом є вивчення процесів іонного трансмембранного переносу на штучній бішаровій ліпідній мембрані. Зрозуміло, що в реальних біологічних об'єктах мембрани містять вбудовані білки та інші компоненти, їх поверхня не плоска і має безліч інших індивідуальних особливостей. Однак для того щоб вивчити закономірності утворення пори, через яку іон проходить через мембрану в клітку або органелу, необхідно створити «чисту» модельну систему, яку можна вивчати експериментальним шляхом і для якої можна використовувати добре розроблений фізичний опис. 9

4. Популяція дрозофіл є класичним об'єктом моделювання мікроеволюційного процесу і прикладом виключно добре знайденої моделі. Ще більш зручною моделлю є віруси, які можуть розмножуватися in vitro. Хоча не зовсім ясно, чи справедливі еволюційні закономірності, встановлені на вірусах, для законів еволюції вищих тварин. Мікробні популяції в проточному культиваторі також є хорошою моделлю мікроеволюційних процесів.

 1.3. Типи моделей Як згадувалося в розділі 1.1, всі моделі можна розділити на матеріальні (фізичні) і знакові (математичні).

Фізична модель - це фізичний об'єкт, «закріплений» за моделлю іншого об'єкта. Наприклад, невеликий шматочок пластика буде представляти модель автомобіля, якщо співвідношення габаритів його деталей збігається з співвідношенням габаритів деталей цього автомобіля. Усі приклади моделей у розділі 1.2 є фізичними моделями. З наведених прикладів видно, що будь-яка фізична модель має специфічні властивості фізичного (в тому числі біологічного) об'єкта. Це його переваги, але це також його обмеження. З одного боку, фізична модель може більш точно передати характеристики модельованого об'єкта. З іншого боку, фізична модель в дослідженнях може бути такою ж складною, як і об'єкт. Як дотепно зауважив один з основоположників кібернетики, «... Краща модель кролика - це кролик ... А найкраще - той же кролик!

Математичні моделі описують цілий клас процесів або явищ, які мають схожі властивості або є ізоморфними. Наука кінця XX століття - синергетика - показала, що подібні рівняння описують процеси самоорганізації самої різної природи: від утворення скупчень галактик до утворення планктонних плям в океані. Якщо вдасться сформулювати «хорошу» математичну модель, весь арсенал науки, накопичений тисячоліттями, можна застосувати до її 10 досліджень. Недарма багато класиків самостійно висловлювали одну і ту ж мудру думку: «Область пізнання стає наукою, коли виражає свої закони у вигляді математичних співвідношень». З цієї точки зору найбільш «науковою» наукою є фізика. Вона використовує математику як свою природну мову. Всі фізичні закони виражаються у вигляді математичних формул або рівнянь. Математика прийшла в хімію в тридцяті роки XX століття разом з хімічною кінетикою і фізичною хімією. Зараз книги з хімії, особливо з хімічної кінетики, фізичної хімії, квантової хімії рясніють математичними символами і рівняннями. Чим складніше об'єкти і процеси, якими займається наука, тим складніше знайти математичні абстракції, придатні для опису цих об'єктів і процесів. У біологію, геологію та інші «описові науки» математика по-справжньому прийшла тільки в другій половині XX століття (а може, ще не прийшла?). Перші спроби математично описати біологічні процеси відносяться до моделей популяційної динаміки. Ця область математичної біології продовжувала служити математичним полігоном, на якому «відпрацьовувалися» математичні моделі в різних областях біології. Включаючи моделі еволюції, мікробіологію, імунологію та інші області, пов'язані з популяціями клітин. Найпершою відомою моделлю, сформульованою в біологічному формулюванні, є знаменитий ряд Фібоначчі, який Леонардо Пізанський наводить у своїй роботі в XIII столітті. Це ряд чисел, що описує кількість пар кроленят, якщо кроленята починають розмножуватися з другого місяця і щомісяця приносять потомство у вигляді пари кроленят. Ряд являє собою послідовність чисел:

1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, ...,

в якій кожен наступний елемент дорівнює сумі двох попередніх. Цікаво, що з незрозумілих причин відношення наступного члена 11 ряду Фібоначчі до попереднього дуже швидко прагне до значення так званого «числа фі» або «золотого перетину»: (√5 + 1) / 2 ≈ 1, 618.... Наступною моделлю, відомою історії, є модель Мальтуса (1798), яка описує відтворення популяції зі швидкістю, пропорційною її чисельності (Ni+1 = q· Ni ; або, в безперервній формі, dN/dt = r· N). У дискретному вигляді цей закон являє собою геометричну прогресію, і записаний у вигляді диференціального рівняння, він є моделлю експоненціального зростання популяції і добре описує зростання клітинних популяцій при відсутності будь-яких обмежень. Ці найпростіші моделі показують, наскільки примітивні математичні моделі в порівнянні з біологічними об'єктами, кожен з яких, наприклад, популяція, являє собою сукупність складно організованих індивідуальних особин - організмів. У свою чергу, кожен організм складається з органів, тканин і клітин, здійснює обмінні процеси, рухається, народжується, росте, розмножується, старіє і вмирає. А кожна жива клітина - це складна неоднорідна система, обсяг якої розмежований мембранами і містить субклітинні органели і так далі, аж до біомакромолекул, амінокислот і поліпептидів. На всіх рівнях живої матерії ми стикаємося зі складною просторово-часовою організацією, неоднорідністю, індивідуальністю, рухливістю, потоками маси, енергії та інформації. Зрозуміло, що для таких систем будь-яка математика дає лише приблизний спрощений опис. Справа значно просунулася з використанням комп'ютерів, що дозволяють моделювати досить складні системи, але тут, як правило, мова йде про моделях, тобто якихось ідеальних копіях живих систем, що відображають лише деякі їх властивості, причому схематично. Комп'ютерні моделі є підтипом математичних моделей і містять «знання» про об'єкт у вигляді математичних формул, таблиць, графіків, баз даних. Вони дозволяють вивчати поведінку системи при зміні внутрішніх характеристик і зовнішніх 12 умов, відтворювати сценарії, вирішувати завдання оптимізації. Однак кожній реалізації комп'ютера відповідають певні, задані параметри системи. Біологічні журнали зараз рясніють математичними формулами і результатами комп'ютерного моделювання. Існують спеціальні журнали, присвячені роботам в області математичних моделей: Journal of Theoretical Biology; біосистеми; Математична екологія, математична біологія, системна біологія та ін. Роботи з математичного моделювання публікуються практично у всіх російських біологічних журналах. В основному моделі є інструментом вивчення конкретних систем, а моделюючі роботи публікуються в журналах, присвячених області біології, до якої належить об'єкт моделювання. Це означає, що модель повинна бути цікавою, корисною і зрозумілою біологам. При цьому вона повинна, звичайно ж, бути професійно зроблена з точки зору математики. Найбільш вдалі моделі виготовляються в співтоваристві фахівцівматематиків або фізиків і біологів, які добре знають об'єкт моделювання. При цьому найскладнішою частиною спільної роботи є формалізація знань про об'єкт (зазвичай у вигляді діаграми) на мові, які потім можуть бути переформульовані в математичну або комп'ютерну модель.

1.4. Класифікація математичних моделей Умовно всі математичні моделі біологічних систем можна розділити на регресійні, якісні та імітаційні. Регресійні залежності - це формули, які описують взаємозв'язок різних характеристик системи, але не претендують на пояснення фізичного або біологічного сенсу цих залежностей. Для побудови регресійної моделі досить статистично значущих кореляцій між змінними або параметрами системи. Приклад: швидкість поглинання кисню листовим опадом (з книги Д. Джефферса «Введення в системний аналіз: застосування в екології», Москва, 1981): 13 lg(Y + 1) = 0,561 – 8,701·10-4 · D +3.935·10-7 · Д 2 + 7,187·10-4 · Б + 0,0398· T, де Y - поглинання кисню, виміряне в мкл/г·год, D - кількість днів, протягом яких зберігалися зразки, B - відсоток вологи в зразках, T - температура в °C. Ця формула дає оцінки швидкості поглинання кисню у всьому діапазоні днів, температур і вологості, які спостерігалися в експерименті, зі стандартним відхиленням поглинання кисню 0,319. Коефіцієнти в регресійних моделях зазвичай визначаються за допомогою процедур ідентифікації параметрів моделі за експериментальними даними. При цьому сума квадратів відхилень теоретичної кривої від експериментальної для всіх точок вимірювання найчастіше зводиться до мінімуму. Імітаційні моделі. За влучним висловом Р. Шеннона (1978), імітаційне моделювання є чимось проміжним між мистецтвом і наукою, напрямок якого цілком обумовлено бурхливим зростанням комп'ютерних технологій. Суть імітаційного моделювання полягає у вивченні складної математичної моделі з використанням обчислювальних експериментів і обробці результатів цих експериментів. При цьому, як правило, творці імітаційної моделі намагаються максимально використати всю доступну інформацію про об'єкт моделювання, як кількісну, так і якісну. Грубо кажучи, процес побудови імітаційної моделі можна представити таким чином. Ми записуємо в будь-якому формалізованому вигляді, доступному комп'ютеру (у вигляді рівнянь, графіків, логічних відносин, імовірнісних законів) все, що знаємо про систему, а потім програємо на комп'ютері варіанти того, що може дати сукупність цих знань при певних значеннях зовнішніх і внутрішніх параметрів системи. Якщо питання, які ми задаємо моделі, стосуються не з'ясування фундаментальних законів і причин, що визначають динаміку реальної системи, а біхевіористського (поведінкового) аналізу системи, як правило 14, виконуваного в практичних цілях, імітаційна модель надзвичайно корисна. Особливо привабливим виявилося використання імітаційних моделей для опису екологічних систем - надзвичайно складних утворень, що включають в себе безліч біологічних, геологічних, метеорологічних та інших факторів. Завдяки можливості відтворення різних «сценаріїв» поведінки і управління, імітаційна модель може успішно використовуватися для вибору оптимальної стратегії експлуатації природної екосистеми або оптимального способу створення штучної екосистеми. При створенні імітаційної моделі можна дозволити собі високу ступінь деталізації при виборі змінних і параметрів моделі. При цьому у різних авторів модель може виявитися різною, так як точних формальних правил її побудови немає. Результати машинних експериментів залежать не тільки від співвідношень, закладених в моделі, але і від організації набору програм, що реалізують модель, і від механізму проведення машинних експериментів. Тому втіленням ідеї імітаційного моделювання слід вважати людино-машинну систему, яка забезпечує імітаційні експерименти в режимі діалогу між людиною, яка проводить експеримент, і «машиною», т. Е. Набором програм. Основні етапи побудови імітаційної моделі наступні.

• Сформульовані основні питання про поведінку складної системи, відповіді на які ми хотіли б отримати. Відповідно до завдань моделювання задається вектор стану системи. Вводиться системний час, який моделює хід часу в реальній системі. Тимчасовий крок моделі також визначається цілями моделювання.

• Система розкладається на окремі блоки, які пов'язані між собою, але мають відносну самостійність. Для 15 кожного блоку визначте, які компоненти вектора стану повинні трансформуватися в процесі його роботи.

• Сформулювати закони і гіпотези, що визначають поведінку окремих блоків і відносини цих блоків один до одного. Для кожного блоку набір законів функціонування доповнюється набором логічних операторів, які формалізують досвід спостереження за динамікою процесів в системі. При необхідності вводиться «внутрішнє системний час» даного модельного блоку, що дозволяє моделювати більш швидкі або повільні процеси. Якщо в блоці використовуються випадкові параметри, правила знаходження деяких їх реалізацій задаються на кожному кроці.

• Розробляються програми, що відповідають окремим блокам. Кожен блок перевіряється за фактичними даними, і при цьому його інформаційні зв'язки з іншими блоками «заморожені». Зазвичай послідовність дій при перевірці блоків наступна: частина наявної інформації використовується для оцінки параметрів моделі, а потім перевіряється адекватність моделі шляхом порівняння розрахункових даних з фактичними.

• Розроблені блоки імітаційної моделі об'єднані на основі стандартного або спеціально створеного математичного програмного забезпечення. Випробувані і відпрацьовані різні схеми взаємодії блоків. На цьому етапі зручно розглядати всю «велику модель» як комплекс автоматів з пам'яттю або без неї, детерміновану або стохастичну. Робота з моделлю полягає потім у вивченні колективної поведінки автоматів у випадковому або детермінованому середовищі.

• Перевіряється імітаційна модель в цілому і перевіряється її адекватність. Цей процес може бути ще менш формалізований, ніж перевірка окремих блоків. Тут вирішальними є знання фахівців-експертів, які добре знають реальну систему. 16

• Плануються експерименти з моделлю. При аналізі їх результатів використовується статистична обробка інформації, графічні форми виведення даних і т. Д. На кожному етапі можуть виникати труднощі, для подолання яких необхідно перебудувати модель, розширити список фазових змінних, уточнити тип їх взаємодій. По суті, створення імітаційної моделі включає в себе шлях послідовних наближень, в ході якого отримується нова інформація про об'єкт моделювання, удосконалюється система спостережень, перевіряються гіпотези про механізми тих чи інших процесів в рамках загальної імітаційної системи. Таким чином, основні завдання імітаційного моделювання:

• перевірка гіпотез про взаємодію окремих елементів і підсистем;

• прогнозування поведінки при зміні внутрішніх характеристик і зовнішніх умов;

• оптимізація управління. Зрозуміло, що розробка імітаційної моделі складної системи і робота з цією моделлю вимагає зусиль цілої команди фахівців, як в області машинної математики, так і в предметній області. На сьогоднішній день в літературі налічуються тисячі імітаційних моделей біологічних систем різного рівня, безліч моделей представлено в інтернеті.

1.5. Приклади імітаційних моделей 1. Молекулярна динаміка. Протягом всієї історії науки стояло питання про те, чи, знаючи координати всіх атомів і закони їх взаємодії, можна описати всі процеси, що відбуваються у Всесвіті. Питання не знайшов своєї однозначної відповіді. Квантова механіка встановила поняття невизначеності на мікрорівні. Більш того, існування квазістохастичних типів поведінки в детермінованих системах робить практично неможливим17 прогнозування поведінки деяких детермінованих систем на макрорівні. Наслідком першого питання є другий: питання про «звідності». Чи можна, знаючи закони фізики, тобто закони руху всіх атомів, що входять до складу біологічних систем, і закони їх взаємодії, описати поведінку живих систем. В принципі, на це питання можна відповісти за допомогою імітаційної моделі, в якій зібрані координати і швидкості всіх атомів живої системи і закони їх взаємодії. Для будь-якої живої системи така модель повинна містити величезну кількість змінних і параметрів і практично нездійсненна, але спроби змоделювати функціонування елементів живих систем - біомакромолекул - з використанням такого підходу робляться ще з 70-х років. «Молекулярна динаміка» - область науки, що дуже швидко і активно розвивається. Функціональні властивості білків, включаючи їх ферментативну активність, визначаються їх здатністю до конформаційних перебудов. Внутрішні рухи атомів і атомних груп глобулярних білків відбуваються з характерними часами порядку 10-13÷10-15 с і амплітудою порядку 0, 02 нм. Значні зміни конформації, наприклад, відкриття «кишені» реакційного центру для утворення ферментно-субстратного комплексу, вимагають колективних узгоджених рухів, характерні часи яких на багато порядків більше, а амплітуди - десятки ангстрем. Простежити, як фізичні взаємодії окремих атомів реалізуються у вигляді макроскопічних конформаційних рухів, стало можливим завдяки методам молекулярної динаміки. Початкові координати і швидкості частинок наведені з урахуванням даних рентгенівської спектроскопії і ядерного магнітного резонансу. Значення параметрів атомно-атомних взаємодій визначаються емпіричним шляхом з умови максимальної відповідності спектральних, термодинамічних і структурних характеристик низькомолекулярних 18 компонентів біологічних макромолекул, розрахованих з потенціалу і експериментально виміряних. На екрані комп'ютера можна спостерігати за траєкторіями руху окремих атомів і внутрішньою рухливістю макромолекули. Перші обчислювальні експерименти для молекули білка – інгібітора трипсину підшлункової залози – були проведені методом молекулярної динаміки в 1977 році. А. Маккамон зі своїми співробітниками. Молекула складається з 58 амінокислотних залишків і містить 454 важких атома, в структуру також увійшли чотири внутрішні молекули води, локалізовані за кристалографічними даними. Вдалося відтворити основний елемент вторинної структури білка – антипаралельну скручену b-структуру, а також короткий a-спіральний сегмент. В останні роки проведені розрахунки молекулярної динаміки сотень білків, а також змодельований перенос електронів в білкових комплексах. При розрахунках спостерігалася значна рухливість білково-білкової контактної області, включаючи переміщення ароматичної групи білка в контактну область в моменти 100 пс. Результати молекулярної динаміки підтверджують роль флуктуації в електронно-конформаційних взаємодіях, що супроводжують процеси транспорту електронів, міграції та перетворення енергії, ферментативного каталізу.

2. Моделі виробничого процесу рослин. Імітаційні моделі процесу виробництва рослин (агробіоценози) для різних культур є однією з перших імітаційних моделей. Практичним завданням моделювання є вибір оптимальної стратегії проведення сільськогосподарських заходів: зрошення, зрошення, внесення добрив з метою отримання максимального врожаю. Існує велика кількість моделей різних культур, як спрощених, призначених для вирішення конкретних управлінських завдань, так і дуже докладних, використовуваних в основному в дослідницьких цілях. Детальні моделі мають ієрархічну блокову структуру. Серед біотичних процесів виділяють блок фотосинтезу, блок 19 кореневого живлення, блок росту і розвитку, блок грунтової мікрофлори, блок розвитку сільськогосподарських хвороб та інші. Розглядаються також геофізичні процеси: формування теплового і водного режимів, концентрація і переміщення біогенних і токсичних солей, концентрація СО2 в посіві та інші. 3. Моделі водних екосистем. Водне середовище набагато більш однорідна, ніж наземні біогеоценози, а імітаційні моделі водних систем успішно створюються з 70-х років XX століття. Опис обмінних процесів у водному середовищі включає опис засвоєння азоту, фосфору та інших поживних речовин, зростання фітопланктону і зоопланктону. При цьому важливо враховувати гідробіологічні процеси в розглянутих водоймах, які, як правило, неоднорідні і при моделюванні діляться на ряд відсіків. Багато імітаційні моделі присвячені розробці оптимальної стратегії лову.

Моделі глобальної динаміки зіграли особливу роль у розвитку імітаційного моделювання. Саме для цих моделей був розроблений формалізм представлення системи у вигляді вузлів і потоків між ними, який потім використовувався в різних формах практично у всіх моделях складних систем. Перша глобальна модель була створена Д. Форрестером і Д. Медоузом зі співавторами на замовлення Римського клубу в 60-х роках XX століття. [J. W. Forrester, World dynamics, Cambridge: Wright-Allen Press, 1972.] Отримані з її допомогою результати були опубліковані в перекладеній на 35 мов знаменитій книзі «Межі зростання» і вперше послужили попередженням людству про те, що Земля - обмежена система, нестримний прогрес призводить до виснаження її ресурсів і людство чекає глобальна екологічна криза. Друга знаменита світова модель - модель ядерної зими - була створена під керівництвом Н.Н. Моїсеєва в Росії. Її результати наочно показали, що глобальна ядерна війна призведе до знищення як переможених, так і переможців, так як після неї небо над усією Землею 20 буде покрито хмарами і настане ядерна зима терміном на кілька десятиліть. Тому перемога в такій війні була б безглуздою. В даний час активно розробляються глобальні моделі для розрахунку «парникового ефекту» та інших процесів, що відбуваються в глобальному масштабі. Зрозуміло, що розробка імітаційної моделі складної системи і робота з цією моделлю вимагає зусиль цілої команди фахівців як в області машинної математики, так і в предметній області. Кожна складна система у своєму функціонуванні підпорядковується фізичним, хімічним і біологічним законам. Однак ми не знаємо всіх законів. Однією з цілей математичного моделювання є встановлення цих закономірностей шляхом перевірки альтернативних гіпотез фізичних (або біологічних) механізмів конкретного явища. Інша, більш практична, - це мета оптимального управління виробничим процесом, про яку ми вже згадували. Таким чином, приступаючи до побудови математичної моделі системи, необхідно подивитися на цю систему під певним кутом зору, що багато в чому визначає тип моделі. Необхідно сформулювати основні питання про поведінку системи, відповіді на які ми хочемо отримати за допомогою моделі. Це дає можливість виділити з безлічі закономірностей, що керують поведінкою системи, ті, вплив яких істотно в пошуку відповідей на поставлені питання. Крім цих законів, при необхідності формулюються певні гіпотези про функціонування системи в цілому або її частин. Гіпотези, як і закони, формулюються у вигляді певних математичних відношень. Подальша робота полягає в дослідженні отриманих співвідношень за допомогою аналітичних або обчислювальних методів, які призводять до відповіді на поставлені перед моделлю питання. Якщо модель хороша, відповіді, отримані на моделі, можна віднести до самої змодельованої системи. Більш того, за допомогою такої моделі можна розширити коло уявлень про систему, наприклад, вибравши одну з альтернативних гіпотез про 21 механізм її функціонування і відкинувши інші, неправдоподібні. Якщо модель погана, тобто неадекватно описує систему з точки зору поставлених перед нею питань, її слід вдосконалити. Критерієм адекватності є практика, експеримент, і цей критерій не може бути повністю формалізований.

1.6. Специфіка моделей живих систем Незважаючи на різноманіття живих систем, всі вони мають наступні специфічні особливості, які необхідно враховувати при побудові моделей.

1. Складні системи. Всі біологічні системи складні, багатокомпонентні, просторово структуровані, елементи яких мають індивідуальність. При моделюванні таких систем можливі два підходи. Перший - агрегований, феноменологічний. Відповідно до цього підходу виявляються визначальні характеристики системи (наприклад, загальна кількість видів) і розглядаються якісні властивості поведінки цих величин у часі (стійкість стаціонарного стану, наявність коливань, існування просторової неоднорідності). Такий підхід історично найдавніший і характерний для динамічної теорії популяцій. Інший підхід - детальний розгляд елементів системи і їх взаємодій, імітаційне моделювання, розглянуте вище. Імітаційна модель зазвичай не допускає проведення аналітичних досліджень, але її параметри мають чіткий фізичний і біологічний сенс; При хорошому експериментальному вивченні фрагментів системи вона може дати кількісний прогноз її поведінки при різних зовнішніх впливах.

2. Системи множення (здатні до автовідтворення). Це найважливіша властивість живих систем визначає їх здатність переробляти неорганічні та органічні речовини для біосинтезу біологічних макромолекул, клітин, організмів. У феноменологічних моделях це 22 властивість виражається в наявності в рівняннях автокаталітичних членів, що визначають можливість зростання (при необмежених умовах - експоненціальних), можливість нестійкості стаціонарного стану в локальних системах (необхідна умова виникнення коливальних і квазістохастичних режимів) і нестійкості однорідного стаціонарного стану в просторово розподілених системах (умова неоднорідних розподілів в просторі і автохвильових режими). Важливу роль у розвитку складних просторово-часових режимів відіграють процеси взаємодії компонентів (біохімічні реакції) і процеси переносу, як хаотичні (дифузія), так і пов'язані з напрямком зовнішніх сил (гравітація, електромагнітні поля) або з пристосувальними функціями живих організмів (наприклад, переміщенням цитоплазми в клітинах під дією мікрофіламентів).

3. Відкриті системи, які постійно проходять через потік речовини і енергії. Біологічні системи далекі від термодинамічної рівноваги, тому описуються нелінійними рівняннями. Лінійні відносини Онзагера, що зв'язують сили і потоки, справедливі тільки поблизу термодинамічної рівноваги.

4. Біологічні об'єкти мають складну багаторівневу систему регуляції. У біохімічної кінетики це виражається в наявності петель зворотного зв'язку, як позитивних, так і негативних, в ланцюгах. У рівняннях локальних взаємодій зворотний зв'язок описується нелінійними функціями, характер яких визначає можливість виникнення і властивості складних кінетичних режимів, включаючи коливальні і квазістохастичні. Такі нелінійності, що враховують просторовий розподіл і процеси перенесення, визначають закономірності стаціонарних структур (плями різної форми, періодичні дисипативні структури) і різні типи поведінки автохвиль (рухомі фронти, біжучі хвилі, провідні центри, спіральні хвилі і т. Д.). 23 На рівні органу, організму, популяції жива система також неоднорідна, і це фундаментальна властивість необхідно враховувати при створенні математичної моделі. Саме виникнення просторової структури і закони її формування являють собою одну із завдань теоретичної біології. Одним з підходів до вирішення такого завдання є математична теорія морфогенезу. У нашому курсі об'єктами моделювання будуть біологічні процеси різних рівнів організації. Оскільки процеси завжди розгортаються в часі, то методами моделювання в нашому випадку будуть методи теорії динамічних систем. Інструменти – диференціальні рівняння з похідними за часом (динамічні моделі), їх якісний аналіз та/або комп'ютерне моделювання. Звичайними цілями моделювання біологічних процесів є:

• з'ясування механізмів взаємодії елементів системи (в тому числі елементів, які експериментально не спостерігаються).

• Ідентифікація та перевірка параметрів моделі на основі експериментальних даних.

 • Оцінка стійкості моделі (саме поняття стійкості вимагає формалізації).

 • Прогнозування поведінки моделі, в т.ч. при різних зовнішніх впливах.