

ГУМАНІТАРНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
"ЗАПОРІЗЬКИЙ ІНСТИТУТ ДЕРЖАВНОГО ТА МУНІЦИПАЛЬНОГО УПРАВЛІННЯ"

В.Є. Бахрушин

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Навчальний посібник

Запоріжжя
2003

ББК 22.18
УДК 519.95:530.1:539
Б30

Друкується за рішенням вченої ради
Гуманітарного університету "ЗІДМУ"
протокол № 3 від 29 жовтня 2003 р.

Рецензенти: **І.М. Ляшенко**, професор, д.ф.-м.н., зав. кафедри математичних методів еколого-економічних досліджень Київського національного університету ім. Тараса Шевченка
Л.М. Любчик, професор, д.ф.-м.н., зав. кафедри комп'ютерної математики та математичного моделювання Національного технічного університету "Харківський політехнічний інститут"

Бахрушин В.Є. Математичне моделювання: Навчальний посібник. – Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ", 2004. – 140 с.
ISBN 966-8227-12-3

Навчальний посібник містить основні відомості з теорії та методів побудови і дослідження математичних моделей, приклади моделей, завдання для лабораторних робіт та самостійної роботи студентів. Посібник призначено для студентів напрямів 0802 – Прикладна математика та 0804 – Комп'ютерні науки. Його також можуть використовувати студенти інших напрямів підготовки при вивченні математичного моделювання і застосування його методів у прикладних дослідженнях.

ББК 22.18
УДК 519.95:530.1:539

ISBN 966-8227-12-3

© Бахрушин В.Є., 2003
© Гуманітарний університет "ЗІДМУ", 2003

ВСТУП

Сьогодні не існує закінченої теорії побудови й аналізу математичних моделей. Тому багато фахівців вважають, що це є скоріше мистецтвом, ніж наукою. Проте практика накопичила багатий досвід побудови моделей, що дає змогу сформулювати деякі загальні принципи і підходи до математичного моделювання.

Метою вивчення дисципліни „Математичне моделювання” студентами напрямів „Прикладна математика” та „Комп’ютерні науки” є надання їм початкових знань і навичок, необхідних для побудови і дослідження математичних моделей складних природних, технічних, екологічних, соціально-економічних та організаційних систем і процесів, навчання студентів основним положенням, загальним підходам та методам математичного моделювання.

Передбачається, що студенти мають підготовку з математичного аналізу, алгебри, аналітичної геометрії, теорії диференціальних рівнянь та обчислювальних методів у межах, встановлених вимогами відповідних освітньо-професійних програм. Крім того, передбачається, що студенти знайомі з основами фізики в рамках програми нетехнічних спеціальностей вищих навчальних закладів.

Згідно з навчальною програмою дисципліни “Математичне моделювання” студенти виконують лабораторні роботи, метою яких є закріплення теоретичного матеріалу і набуття практичних навичок побудови й дослідження математичних моделей типових систем та процесів. У першій частині лабораторного практикуму студентам пропонується побудувати й дослідити моделі типових фізичних систем і процесів, а також статистичні та регресійні моделі. Дослідження фізичних систем ґрунтується на знаннях, одержаних під час вивчення курсів загальної фізики, рівнянь математичної фізики та обчислювальних методів. Завдання сформульовано таким чином, що припускають різні рівні деталізації моделі, яка досліджуватиметься. Найпростіші моделі здебільшого можна побудувати на основі матеріалу, що входить до шкільного курсу фізики. Володіння матеріалом, що вивчається в курсі загальної фізики, дає студентові змогу розробити достатньо повну і закінчену модель для всіх запропонованих систем.

Автор вдячний за обговорення матеріалу посібника, окремих питань математичного моделювання та програми курсу рецензентам рукопису Л.М. Любчику та І.М. Ляшенку, а також чл.-кор. НАН України В.В. Сльозову та В.Г. Литовченку, професорам О.М. Горбаню, Г.В. Корнічу, О.І. Михайльову, С.Г. Міхліну, В.В. Слесарєву, Д.Я. Хусаїнову, доцентам В.Г. Бондаренку, В.М. Буйницькій, І.М. Нацюку, В.П. Пінчуку, Л.Н. Сергєєвій, Ю.О. Швецю.

1. ЗАГАЛЬНІ ПИТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Математичне моделювання є одним із основних сучасних методів дослідження. Загалом під моделюванням розуміється процес дослідження реальної системи, який включає побудову моделі, її дослідження та перенесення одержаних результатів на досліджувану систему. Модель можна визначити як об'єкт, що в деяких відношеннях збігається з прототипом і є засобом опису, пояснення та/або прогнозування його поведінки. Під математичною моделлю реальної системи (процесу) розуміється сукупність співвідношень (формул, рівнянь, нерівностей, логічних умов, операторів тощо), які визначають характеристики станів системи залежно від її параметрів, зовнішніх умов (вхідних сигналів, впливів), початкових умов та часу. Загалом, за визначенням В.М. Глушкова, математична модель – це множина символічних математичних об'єктів і співвідношень між ними. За М.М. Амосовим, математична модель – це система, що відображає іншу систему.

1.1. Приклади математичних моделей

З курсу фізики середньої школи, відомо, що для опису руху матеріальної точки під дією постійної сили \mathbf{F} можна використовувати таке рівняння:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t + \frac{\mathbf{F}t^2}{2m}, \quad (1.1)$$

де $\mathbf{r}(t)$ – радіус-вектор точки в момент часу t , \mathbf{r}_0 – радіус-вектор точки у початковий момент часу, \mathbf{v}_0 – початкова швидкість, m – маса. Це рівняння можна розглядати як найпростішу математичну модель руху.

У більш складних випадках, коли сила не є постійною, модель 1.1 може бути перетворена різними способами. Зокрема, якщо відома величина сили для кожного моменту часу, математичну модель руху можна записати у вигляді системи, що складається з диференціального рівняння другого степеня і двох початкових умов:

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}}{m}; \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0; \quad \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_0. \quad (1.2)$$

Якщо для кожного моменту часу відомий радіус-вектор точки, то математичну модель руху можна подати у вигляді степеневого ряду

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + t \left. \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|_{t=0} + \frac{t^2}{2!} \left. \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \right|_{t=0} + \frac{t^3}{3!} \left. \frac{d^3\mathbf{r}}{dt^3} \right|_{t=0} + \dots + \frac{t^n}{n!} \left. \frac{d^n\mathbf{r}}{dt^n} \right|_{t=0}. \quad (1.3)$$

У багатьох випадках математичні моделі складних процесів подаються у вигляді систем диференціальних рівнянь. Зокрема, Г.І. Марчук запропонував таку **модель взаємодії імунної системи організму людини з антигеном**:

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = (\beta - \gamma F) V; \\ \frac{dC}{dt} = \xi Q(t - \tau) - \mu_C (C - C_0); \\ \frac{dF}{dt} = \rho C - (\mu_f + \eta \gamma V) F; \\ \frac{dM}{dt} = \sigma V - \mu_M M. \end{cases} \quad (1.4)$$

Тут:

V – кількість вірусів у організмі;

C – кількість плазмових клітин, що виробляють антитіла;

F – кількість антитіл;

M – маса тканини, пошкодженої вірусами;

β – коефіцієнт розмноження вірусів, тобто кількість нових вірусів, яку створює кожен з них у середньому за одиницю часу;

γ – коефіцієнт, що відображає ймовірність нейтралізації вірусу при його зустрічі з антигеном ($\gamma = \text{const}$);

ξ – коефіцієнт, що відображає ймовірність збудження реакції створення каскаду плазмових клітин одним антигеном;

$Q(t - \tau)$ – швидкість утворення плазмових клітин;

τ – інкубаційний період, тобто час, потрібний для організації каскаду клітин і початку масового синтезу антитіл;

μ_C – коефіцієнт, обернено пропорційний часу життя плазмових клітин;

C_0^* – імунологічний рівень плазмових клітин в організмі;

ρ – коефіцієнт відтворення антитіл за одиницю часу з розрахунку на одну клітину;

μ_f – коефіцієнт, обернено пропорційний середньому часу розпаду антитіл;

η – коефіцієнт, що відображає ймовірність розпаду антитіла при нейтралізації ним вірусу;

σ – коефіцієнт, що відображає ступінь пошкодження органа одним вірусом за одиницю часу;

μ_M – коефіцієнт, обернено пропорційний часу відновлення пошкодженої частини органа в e разів.

Рівняння системи 1.4 відображають відповідно швидкість зростання кількості вірусів, плазмових клітин, антитіл та маси пошкодженої тканини в організмі. При цьому позитивні доданки відповідають їх утворенню, а негативні – розпаду.

Операторне рівняння (рівняння Шредингера)

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z, t) \Psi, \quad (1.5)$$

де \hbar – стала Планка, Ψ – хвильова функція, t – час, x, y, z – координати частинки, m – її маса, U – потенціальна енергія, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа, можна розглядати як **математичну модель, що описує зміну стану квантової частинки за часом.**

Математична модель електростатичного поля, що відображає теорему Гауса, записується як інтегральне рівняння

$$\oint (\mathbf{E} d\mathbf{S}) = 4\pi q, \quad (1.6)$$

де \mathbf{E} – напруженість електричного поля, $d\mathbf{S}$ – елемент поверхні. Ліва частина рівняння 1.6 виражає потік вектора напруженості електричного поля через замкнену поверхню, всередині якої знаходиться електричний заряд q .

Динамічна модель міжгалузевого балансу Леонтьєва має вигляд матричного рівняння

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}\dot{\mathbf{x}}(t) + \mathbf{c}(t), \quad (1.7)$$

де $\mathbf{x}(t)$ – вектор-колонка обсягів виробництва, $\dot{\mathbf{x}}(t)$ – вектор-колонка абсолютних швидкостей приросту виробництва (похідних обсягів виробництва за часом), \mathbf{A} – матриця коефіцієнтів прямих матеріальних витрат, \mathbf{B} – матриця коефіцієнтів капіталомісткості приростів виробництва (витрати виробничого накопичення на одиницю приросту відповідних видів продукції), $\mathbf{c}(t)$ – вектор-колонка споживання.

Математичні моделі складних систем і процесів можна подавати у вигляді графів. Наприклад, на рис. 1.1 наведено граф, що є **математичною моделлю ділянки залізниці** в Запорізькій області й прилеглих районах.

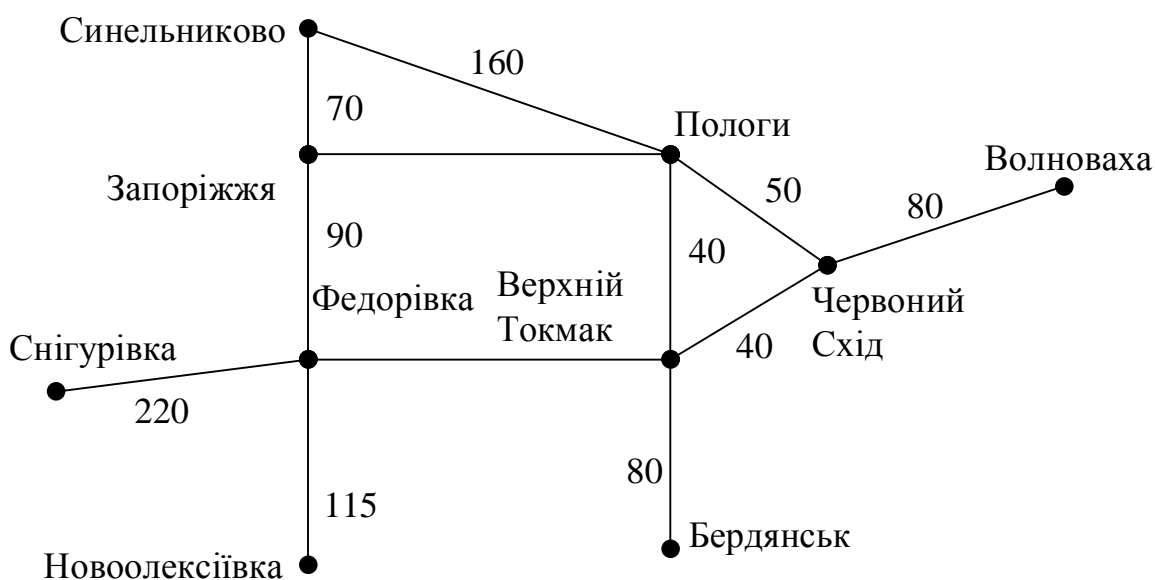


Рис. 1.1. Математична модель ділянки залізниці в Запорізькій області

Вершинами графа є вузлові станції. Його ребра характеризують їх з'єднання між собою, а також відстані між ними (наведені відстані є умовними).

Як **математичні моделі побудови кристалів** використовують точкові групи симетрії. Кожна група містить властивий для неї набір елементів симетрії. Зокрема, точкова група O_h , що відповідає кристалам з кубічною решіткою, містить центр симетрії, 3 поворотні осі симетрії 4-го порядку, 4 поворотні осі 3-го порядку, 6 поворотних осей 2-го порядку, а також 9 площин дзеркального відображення. Під поворотними осями n -го порядку тут розуміють такі осі, при повороті відносно яких на $\frac{2\pi}{n}$ градусів кристал суміщається з собою.

1.2. Класифікації і методи дослідження математичних моделей

Типовими завданнями моделювання можуть бути пошук оптимальних чи наближених до оптимальних рішень; визначення властивостей системи; встановлення взаємозв'язків між її елементами або характеристиками, а також між характеристиками системи та зовнішнього середовища тощо.

Складні системи можна охарактеризувати функціями, що вони виконують (процесами, які відбуваються в них), структурою, а також поведінкою в часі. Відповідно розрізняють функціональні, структурні, інформаційні та поведінкові (подійні) моделі систем. **Функціональна модель системи** описує сукупність функцій, що їх виконує система (сукупність про-

цесів, які відбуваються в ній), характеризує склад та взаємозв'язки її функціональних підсистем. **Структурна модель** відображає побудову системи; інформаційна – відношення між елементами системи, а також між системою і зовнішнім середовищем. Остання будується у вигляді структур даних, що характеризують елементи системи, зовнішнє середовище та взаємозв'язки між ними. **Інформаційна модель** також може мати вигляд рівнянь регресії або кореляційних рівнянь, які відображають зв'язок між рядами даних, статистичного опису сукупності даних, порівняльних статистичних характеристик наборів даних тощо. **Поведінкова модель** відображає динаміку функціонування системи, зміни її станів, події, що відбуваються в ній, тощо.

Розглянемо детальніше цю класифікацію на прикладі такої системи, як тверде тіло. Функціональні моделі мають відображати процеси, що відбуваються в системі. Для твердого тіла це можуть бути моделі, які описують теплопровідність, електропровідність, дифузію, коливання кристалічної решітки, поглинання та розсіювання світла тощо. Структурні моделі відображають побудову твердого тіла. Для ідеального кристалу таку модель можна сформулювати як сукупність елементів симетрії кристалічної решітки (просторова або точкова група симетрії), як геометричний опис елементарної решітки кристалу, як віднесення до деякого класу структур (наприклад, "об'ємно центрована кубічна решітка", "решітка типу алмазу") тощо. Інформаційними моделями твердого тіла є, наприклад, залежності його фізичних властивостей (питомий електричний опір, період кристалічної решітки, питома теплоємність та інші) від зовнішніх параметрів (температура, тиск, напруженість електричного або магнітного полів тощо), спектри оптичного поглинання, рентгенограми тощо. Інформаційними моделями будуть також взаємозв'язки між різними властивостями, зокрема залежність коефіцієнта дифузії деякої домішки від умісту інших домішок. Ці моделі можна побудувати у вигляді таблиць даних, графіків або функцій. Прикладами поведінкових моделей твердого тіла можуть бути моделі зміни фізичних властивостей за часом (зокрема моделі повзучості, деградації твердого тіла під впливом опромінювання тощо), діаграми фазових рівноваг, моделі фазових перетворень, переходів бістабільних кристалів між різними станами та інші.

Існує багато різних класифікацій математичних моделей. Зокрема, виділяють моделі статичні та динамічні, диференціальні й інтегральні, детерміністичні та стохастичні, лінійні та нелінійні, геометричні, топологічні, імітаційні, оптимізаційні тощо. Найбільш поширеними формами запису математичних моделей є інваріантна, аналітична, алгоритмічна та схемна (графічна). В інваріантній формі моделі записують за допомогою алгебраїчних, диференціальних, інтегральних та інших рівнянь і нерівностей, без урахування методу подальшого аналізу моделі. Аналітична форма

– це запис моделі у вигляді аналітичного розв’язку вихідних рівнянь інваріантної моделі. Алгоритмічна форма є записом алгоритму дослідження вихідної моделі, тобто послідовності операцій, що здійснюються при такому дослідженні. Моделі, записані у графічній формі, – це геометричні та топологічні об’єкти, графи, схеми, графіки тощо.

З погляду практичного використання важливою є класифікація моделей за методом їх подальшого аналізу. При цьому виділяють моделі, які досліджують аналітично, чисельно та за допомогою апаратного моделювання (аналогових обчислювальних машин).

У першому випадку вихідна математична модель має бути перетворена в таку систему співвідношень, яка дає можливість одержати необхідний результат аналітичними методами. Зазвичай результатом аналітичного дослідження є побудова формул, що задають шукані величини в явному вигляді; перетворення рівнянь до вигляду, для якого відомий аналітичний розв’язок, тощо. Результатами аналітичного дослідження також можуть бути якісні висновки про наявність особливих точок, асимптотику, монотонність і однозначність залежності, стійкість розв’язку та інші. Розвиток комп’ютерної техніки та програмного забезпечення дає змогу використовувати для аналітичних досліджень математичних моделей прикладні пакети символічних обчислень, такі як Maple, Maxima, Reduce тощо, що значно розширює можливості здійснення аналітичних досліджень.

Утім, для одержання аналітичного розв’язку часто необхідно спростити вихідну математичну модель. Типовими прикладами таких спрощень є розкладання складної залежності в ряд Тейлора або Фур’є та врахування лише кількох перших членів цього ряду, зневажання деякими величинами, які вважаються малими, тощо. У більшості реальних випадків математична модель не може бути перетворена до вигляду, який дає можливість одержати аналітичний розв’язок за умови збереження її адекватності. Тому для дослідження моделі використовуються інші методи.

Чисельне дослідження має ширшу сферу застосування, ніж аналітичне. Це зумовлено тим, що обчислювальні методи аналізу можуть застосовуватися до більш широкого кола математичних моделей. До недавнього часу використання обчислювальних методів стримували складність і громіздкість одержуваних виразів. Але сучасний стан розвитку обчислювальної техніки значною мірою знімає такі обмеження. Принциповим недоліком обчислювальних методів є те, що з їх допомогою можна виконувати лише аналіз окремих випадків. Тому одержувані розв’язки не будуть повними. Вони характеризують поведінку та властивості досліджуваних систем і процесів лише за певних умов, які мають бути чітко визначеними.

Ще однією проблемою при використанні обчислювальних методів може бути некоректність поставленої задачі, тобто відсутність у неї розв'язку, його нестійкість або наявність декількох розв'язків. Умову стійкості можна сформулювати в такому вигляді:

$$\|\delta y\| \rightarrow 0, \text{ якщо } \|\delta x\| \rightarrow 0, \quad (1.8)$$

де δx – вектор похибок вихідних даних, δy – вектор похибок результатів.

Нестійкість розв'язку означає, що малі похибки значень вихідних параметрів можуть призводити до великих похибок одержуваних результатів. У таких випадках застосування обчислювальних методів не має сенсу. Можливі ситуації слабкої стійкості (поганої зумовленості), коли умова (1.8) формально виконується, але похибка результату є неприпустимо великою.

Прикладами коректних задач можуть бути знаходження коренів полінома; розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь у випадку, коли кількість рівнянь дорівнює кількості невідомих, і детермінант матриці, складеної з коефіцієнтів рівнянь, є відмінним від нуля; розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь тощо.

Для дослідження математичних моделей, що побудовані у вигляді диференціальних рівнянь та їх систем, застосовують також аналогове моделювання. У цьому разі використовують спеціальні установки, які називають аналоговими обчислювальними машинами. Як правило, це електричні ланцюги, що містять активні опори, конденсатори, котушки індуктивності та джерела струму. Залежності сили току та напруги від часу в таких ланцюгах описуються різноманітними диференціальними рівняннями. Це дає змогу одержувати розв'язки відповідних рівнянь у чисельному або графічному вигляді, виконуючи вимірювання відповідних електричних величин.

При дослідженні складних систем і процесів використовують також методи, основані на дослідженні їх аналогів. Аналогами називають різні за змістом процеси, що описуються одними й тими самими математичними моделями. Це дає можливість вивчати складні для експериментального дослідження природні, технічні та соціально-економічні системи за допомогою інших методів. Часто існування аналогів зумовлено дією більш загальних законів, тому дослідження аналогів сприяє глибшому розумінню досліджуваних систем і процесів.

Класичними прикладами аналогів є фізичні процеси перенесення – теплопровідність, дифузія та електропровідність. Густина потоку тепла

\mathbf{j}_T , потоку частинок \mathbf{j}_n та електричного струму \mathbf{j}_E підкоряються, відповідно, першому закону Фур'є для теплопровідності, першому закону Фіка для дифузії та закону Ома:

$$\mathbf{j}_T = -\lambda_T \nabla T, \quad \mathbf{j}_n = -D \nabla n, \quad \mathbf{j}_E = -\sigma \nabla \varphi, \quad (1.9)$$

де λ_T – коефіцієнт теплопровідності, T – температура, D – коефіцієнт дифузії, n – концентрація дифундуючих частинок, σ – питома електрична провідність, φ – потенціал електричного поля.

Для нестационарних процесів також спостерігається аналогія:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T, \quad \frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\sigma}{C^*} \nabla^2 \varphi, \quad (1.10)$$

де t – час, a – коефіцієнт температуропровідності, $C^* = \frac{dq}{d\varphi}$ – питома електрична ємність матеріалу, q – електричний заряд.

Закон подібності між теплопровідністю та електричним струмом має вигляд:

$$\frac{\sigma}{C^* a} \frac{t_E}{t_T} \left(\frac{\ell_T}{\ell_E} \right)^2 = 1, \quad (1.11)$$

де ℓ , t – відповідні довжини та часи. Цей закон містить два коефіцієнти подібності $\frac{t_E}{t_T}$ і $\frac{\ell_T}{\ell_E}$, а також критерій подібності (число Бойкена) $Beu = \frac{\sigma}{C^* a}$.

Закон подібності між теплопровідністю та дифузією має вигляд:

$$\frac{a}{D} \frac{t_T}{t_D} \left(\frac{\ell_D}{\ell_T} \right)^2 = 1. \quad (1.12)$$

У цьому разі коефіцієнтами подібності є $\frac{t_T}{t_D}$ і $\frac{\ell_D}{\ell_T}$, а критерієм подібності –

число Льюїса $Le = \frac{a}{D}$.

Розглянемо як приклад математичну модель дифузії домішки у твердому тілі. Вихідну модель у разі вільної дифузії можна записати в такому вигляді:

$$\begin{cases} \vec{j}_n = -D(\vec{r}, t) \cdot \text{grad } n(\vec{r}, t); \\ \frac{\partial n}{\partial t} = \text{div} (D(\vec{r}, t) \text{grad } n(\vec{r}, t)) ; \\ n(\vec{r}_0, t) = \varphi(t); \\ n(\vec{r}, t_0) = \psi(\vec{r}) , \end{cases} \quad (1.13)$$

де \vec{r} – радіус-вектор.

Модель 1.13 не має аналітичного розв'язку. Але за деяких умов вона може бути перетворена до моделей, що можна досліджувати аналітично. Наприклад, однією з типових задач дифузії є одновимірна дифузія з необмеженого однорідного плоского джерела в напівнескінченне однорідне тіло при сталому коефіцієнті дифузії. Така модель дифузії широко використовується при аналізі багатьох процесів хіміко-термічної обробки металів, процесів створення твердотілих електронних приладів тощо. Для цього випадку, якщо можна нехтувати присутністю домішки в тілі при $t = 0$, модель 1.13 набирає вигляду:

$$\begin{cases} j = -D \frac{dn}{dx}; \\ \frac{dn}{dt} = D \frac{d^2 n}{dx^2}; \\ n(0, t) = n_0; \\ n(x, 0) = \begin{cases} n_0 & (x = 0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases} . \end{cases} \quad (1.14)$$

Із системи 1.14 можна одержати таке рівняння, що описує концентрацію в довільний момент часу в довільній точці тіла:

$$n(x, t) = n_0 \text{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right), \quad (1.15)$$

де

$$\text{erfc} (z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx . \quad (1.16)$$

Інтеграл, який міститься у виразі 1.16, не є аналітичним, проте його значення може бути розраховано з будь-якою заданою точністю. Це дозволяє вважати формулу 1.12 аналітичним розв'язком системи 1.14.

У дійсності зроблені припущення або не виконуються взагалі, або виконуються лише приблизно. Зокрема, тіло, в яке дифундує домішка, зазвичай буває не зовсім однорідним. Тому коефіцієнт дифузії в точці залежить від її радіус-вектора. Крім того, він залежить також від концентрації домішки i , внаслідок цього, від часу. Реальні тіла завжди скінченні, а джерела домішки обмежені. Якщо цими обставинами нехтувати не можна, то модель 1.13 не має аналітичного розв'язку і її дослідження слід виконувати за допомогою обчислювальних методів.

Загальна схема чисельного дослідження системи 1.13 може бути такою. На першому етапі задають початковий розподіл концентрації домішки $n(x,0)$, крок за часом Δt і крок за координатою Δx . Це дозволяє обчислити похідну

$$\left. \frac{d^2 n}{dx^2} \right|_{x,t=0} = \frac{n(x+2\Delta x,0) - 2n(x,0) + n(x-2\Delta x,0)}{4\Delta x^2} \quad (1.17)$$

для будь-якої точки тіла. За її значеннями можна розрахувати швидкості зміни концентрації у відповідних точках для початкового моменту часу

$$\left. \frac{dn}{dt} \right|_{x,t=0} = D \left. \frac{d^2 n}{dx^2} \right|_{x,t=0}. \quad \text{Після цього знаходять розподіл концентрації домішки}$$

для наступного моменту часу:

$$n(x, \Delta t) = n(x,0) + \left. \frac{dn}{dt} \right|_{x,t=0} \Delta t. \quad (1.18)$$

Потім визначають нові значення похідної $\left. \frac{d^2 n}{dx^2} \right|_{x,t=\Delta t}$, нові швидкості

зміни концентрації в усіх точках і значення концентрації для наступного моменту часу $t = 2\Delta t$. Продовжуючи цю процедуру, можна одержати розподіл домішки у твердому тілі для будь-якого моменту часу.

Аналогове дослідження системи 1.13 може бути основане на тотожності математичних моделей процесів дифузії та теплопровідності або

електропровідності. У загальному вигляді математична модель для розрахунку розподілу температури в твердому тілі може бути такою:

$$\begin{cases} \vec{j}_T = -\lambda_T(\vec{r}, t) \cdot \text{grad } T(\vec{r}, t) ; \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda_T(\vec{r}, t) \text{grad } T(\vec{r}, t)) ; \\ T(\vec{r}_0, t) = \zeta(t) ; \\ T(\vec{r}, t_0) = \zeta(\vec{r}) . \end{cases} \quad (1.19)$$

Вимірювання розподілу температури в деяких випадках є більш простою експериментальною задачею, ніж вимірювання розподілу концентрації домішки. Тоді розподіл концентрації можна знайти таким чином. На першому етапі визначають параметри системи, для якої будуть вимірювати розподіл температури. Потім експериментально визначають розподіл температури. Після цього з використанням критеріїв подібності його перераховують у розподіл концентрації.

Важливий клас математичних моделей складних систем становлять імітаційні моделі. При імітаційному моделюванні відтворюють елементарні явища, що відбуваються в досліджуваній системі, зі збереженням їх структури, взаємозв'язків та послідовності протікання. Це дає змогу вивчати розвиток системи в часі, розв'язувати більш складні задачі порівняно з аналітичним моделюванням, дає можливість враховувати наявність дискретних і неперервних елементів, нелінійність характеристик елементів системи, випадкові впливи та інші ефекти. Варіантами імітаційного моделювання є метод статистичних випробувань (метод Монте-Карло) і метод статистичного моделювання. Метод Монте-Карло передбачає багаторазове відтворювання процесів, що є реалізаціями випадкових величин або функцій, та подальшу статистичну обробку одержаних результатів. Він використовується для моделювання випадкових величин та функцій, статистичні характеристики яких попередньо були одержані як розв'язки аналітичних задач. Метод статистичного моделювання використовується для дослідження випадкових впливів на характеристики досліджуваних систем або процесів.

1.3. Основні властивості математичних моделей

До основних властивостей математичних моделей належать їх скінченність, спрощеність, наближеність, повнота, адекватність та істинність.

Скінченність моделі означає, що вона відображає лише деякі з характеристик та відношень, властивих оригіналу. Її зумовлено обмеженістю ресурсів часу, пам'яті ЕОМ тощо, потрібних для розробки й аналізу моделі.

Спрощеність моделі означає, що в деяких відношеннях вона має бути простішою за оригінал. У цьому полягає сенс моделювання, оскільки у протилежному разі доцільніше досліджувати оригінал. Спрощення досягають шляхом нехтування другорядними, несуттєвими для досягнення мети моделювання властивостями оригіналу. При побудові моделей використовують принцип руху від простого до складного. Тобто, спочатку будують найпростішу можливу модель досліджуваної системи (як правило, такі моделі можна знайти у фаховій літературі). Потім перевіряють її адекватність. Якщо простіша модель неадекватна, то визначають, чим зумовлено її неадекватність. Зазвичай причинами є нехтування у змістовній моделі деякими факторами, що істотно впливають на досліджувану систему, або надмірна спрощеність математичної моделі.

Наближеність моделі означає, що вона лише наближено відображає досліджувані характеристики та відношення. Типовими прикладами наближень, які використовують при математичному моделюванні, є заміна дискретних систем неперервними та навпаки, задання обмежень на точність чисельних розрахунків, заміна нелінійних залежностей лінійними тощо. Ступінь наближеності моделі визначається компромісом між необхідністю відображення всіх суттєвих властивостей оригіналу й обмеженістю часу, пам'яті ЕОМ та інших ресурсів.

Зі скінченності та наближеності моделі випливає, що вона відображає оригінал неповно. Ступінь повноти моделі визначається метою та завданнями моделювання.

Адекватність моделі характеризує можливість реалізації мети моделювання, а істинність – її відповідність сукупності наявних знань про об'єкт дослідження. Критеріями адекватності є відображення всіх істотних властивостей та параметрів об'єкта дослідження, якісно правильне відображення суттєвих зв'язків між параметрами, а при кількісному дослідженні також мала різниця між результатами моделювання та наявними емпіричними даними. Адекватність є обов'язковою вимогою до будь-якої моделі, що використовується для дослідження реальних систем. Але в деяких випадках застосовують відносно прості моделі, що не є адекватними. Це доцільно, зокрема, під час розробки алгоритмів аналізу моделей (на першому етапі розробляють алгоритми аналізу неадекватних моделей, які потім використовують як елементи більш складної моделі), у навчальному процесі (зокрема, коли треба дослідити явища, які в реальних системах та процесах спотворюються іншими ефектами) тощо. Слід пам'ятати, що істинність моделі не є гарантією її адекватності. Зокрема, це може бути зумовлено накопиченням похибок за необхідності виконання великого обсягу розрахунків. З іншого боку, адекватними можуть бути моделі, що не є істинними. Типовими прикладами є регресійні моделі, які дають змогу прогнозувати поведінку досліджуваної системи в деякому діапазоні зміни

вхідних параметрів, але не відображають наявних знань про побудову, зв'язки та внутрішні процеси в ній.

1.4. Загальна схема математичного моделювання

Загальна схема побудови математичної моделі є такою. Насамперед необхідно визначити, для чого необхідна модель. Це має принципове значення для обрання методу її побудови. Існують два основні підходи. У першому випадку математична модель ґрунтується на основі відомих теоретичних даних про закономірності поведінки системи або протікання процесу. У цьому разі одержувана математична модель буде системою відомих з теорії моделей. Перевагами такого підходу є відповідність структури моделі реальній структурі об'єкта дослідження. Завдяки цьому всі параметри моделі мають реальний фізичний, економічний, технічний або інший зміст. Такі моделі дають змогу аналізувати не тільки загальні властивості системи як цілого, але також і поведінку окремих її елементів, зміни структури, визначати відносні вклади різних факторів у властивості, що спостерігаються, тощо. Недоліками цього підходу зазвичай є складність одержуваних моделей і, внаслідок цього, можливість накопичення похибок при розрахунку вихідних характеристик об'єкта дослідження.

У другому випадку моделлю є рівняння регресії (або система таких рівнянь), за допомогою якого можна прогнозувати, як будуть змінюватися характеристики системи або процесу при зміні вхідних змінних. Рівняння регресії відповідає розгляду досліджуваної системи як чорного ящика. Тому такі моделі принципово неможливо використовувати для оцінювання вкладу окремих підсистем у формування загальних властивостей системи, аналізу структури системи, зв'язків між її елементами тощо. Коефіцієнти рівнянь регресії часто не мають якогось реального змісту. Проте регресійні моделі відрізняються простотою і у багатьох випадках дають можливість одержувати більш точні оцінки вихідних характеристик досліджуваних систем та процесів.

У багатьох випадках при побудові моделей складних систем і процесів використовують комбінації цих підходів. Зокрема, часто базову модель будують як систему відомих теоретичних моделей, параметри яких визначають за допомогою регресійного аналізу.

Якщо модель будують у вигляді системи відомих теоретичних моделей, то наступним етапом її розробки є визначення концептуальної або змістовної (фізичної, технічної, економічної тощо) моделі об'єкта дослідження. Змістовну модель будують на основі відомих теоретичних та емпіричних даних про досліджуваний об'єкт. На цьому етапі визначають суттєві для розв'язуваної задачі елементи системи, взаємозв'язки між ними, взаємозв'язки системи й навколишнього середовища, можливі стани

системи, закономірності поведінки системи в цілому та її окремих елементів тощо. Потім переходять від змістовного до формального опису, тобто відбирають теоретичні моделі, з яких будуватиметься загальна математична модель об'єкта дослідження, визначають межі застосування зроблених у них припущень і спрощень.

Далі процедура розробки моделі залежить від обрання методики її подальшого аналізу. На сьогодні найбільш поширеним методом дослідження математичних моделей є їх чисельний аналіз за допомогою ЕОМ. Для цього можна використовувати різноманітні математичні, статистичні та інші прикладні пакети програмного забезпечення, зокрема Microsoft Excel, MathCad, MathLab, Mathematica, Statistica тощо. Але слід мати на увазі, що не існує алгоритмів чисельних розрахунків, які б давали змогу одержати задовільні розв'язки для всіх задач деякого класу. Якість роботи алгоритму залежить не тільки від типу задачі, але й від її конкретних умов та параметрів. Тому обрання алгоритму є нетривіальною задачею. Як правило, якість алгоритму (й моделі взагалі) визначають порівнянням результатів, одержуваних за різними алгоритмами розрахунків, зокрема виконанням розрахунків для моделей з відомими характеристиками, а також порівнянням результатів моделювання з відомими даними про модельовану систему (якісними закономірностями її поведінки, кількісними значеннями її параметрів тощо). У типових прикладних пакетах, як правило, не вказується конкретний алгоритм, за яким виконуються розрахунки. Більше того, досить часто не вказується також математичний метод, на якому базується цей алгоритм. Це суттєво ускладнює попередній аналіз можливості застосування прикладних пакетів у дослідженні тієї чи іншої моделі, а також пошук джерел похибок моделювання.

Важливою характеристикою результатів моделювання є похибка одержуваних результатів. Можна виділити такі її основні складові: похибка математичної моделі, похибка вихідних даних, похибка розрахункового алгоритму та похибка обчислень.

Похибка математичної моделі пов'язана з тим, що будь-яка модель є лише наближеним відображенням об'єкта моделювання. Джерелами цієї похибки є припущення, що роблять при розробці змістовної моделі об'єкта дослідження, а також наближеність при побудові її математичної моделі. Зокрема, наближеність моделі 1.13 визначається припущеннями про однорідність твердого тіла, незалежність коефіцієнта дифузії від концентрації домішки та від часу, нехтуванням впливу внутрішніх та зовнішніх електромагнітних полів на поведінку електрично заряджених домішок тощо. Якщо необхідно, похибку моделі можна зменшити шляхом урахування додаткових факторів, що впливають на вимірювані характеристики.

Похибка вихідних даних пов'язана з погрішностями вимірювань, використанням наближених значень параметрів досліджуваної системи, за-

міною генеральних сукупностей вибірками обмеженого обсягу, використанням даних, підданих попередній статистичній обробці, тощо. Вона може бути зменшена тільки шляхом виконання повторних або додаткових експериментів та спостережень.

Похибка розрахункового алгоритму пов'язана зі спрощеннями та припущеннями, що роблять при заміні вихідної математичної моделі алгоритмом обчислень. Зокрема, більшість методів чисельного знаходження інтегралів використовує заміну площі під кривою, що інтегрується, на суму площ відносно простих фігур. При цьому похибка інтегрування суттєво залежить від того, які саме фігури буде обрано для наближення, а також від кількості ділянок, на які розбивають інтервал інтегрування. Багато алгоритмів використовують ітераційні процедури, що теоретично можуть виконуватися нескінченно довго, поступово наближуючись до точного розв'язку. Але у практиці час виконання ітерацій має бути обмеженим. Тому необхідно заздалегідь встановити точність результату, яка задовольняє дослідника.

Похибка обчислень пов'язана з необхідністю обмеження кількості значущих цифр у числах, з якими виконують розрахунки.

Похибки розрахункового алгоритму та обчислень належать до усувних похибок, оскільки вони можуть бути зменшені до необхідного рівня шляхом унесення змін до алгоритму та підвищення точності розрахунків. Похибки вихідних даних та моделі належать до неусувних похибок. Це треба розуміти так: ці похибки не можна усунути або зменшити математичними методами, але точність моделювання може бути підвищена шляхом обрання більш адекватної моделі (цей етап є неформальним, і для його реалізації необхідно використовувати не тільки математичні методи, а й дані відповідних конкретних наук), а також підвищення точності вихідних даних.

При побудові моделі необхідно прагнути до балансу похибок різного типу. Це зумовлено тим, що похибка моделювання визначається найбільшою з них. Підвищувати точність розрахунків на деякому етапі моделювання недоцільно, якщо вихідні дані для нього мають суттєво меншу точність або якщо результати цього етапу потім використовують для розрахунків зі значно більшою похибкою. Можна рекомендувати таку послідовність балансу похибок. На першому етапі необхідно визначити погрішність вихідних емпіричних даних, що використовуватимуться при розрахунках, та характер впливу цієї похибки на результати моделювання. Загалом погрішність результатів перевищує погрішність вихідних даних і є тим вищою, що складніша модель. Але при цьому слід розрізняти систематичну та випадкову похибки моделювання. У деяких випадках погрішність визначення сталих коефіцієнтів, що входять до моделі, призводить лише до появи систематичної похибки. Якщо цей коефіцієнт використо-

вують у моделі як самостійний доданок, то його похибка зумовлює збільшення або зменшення результату на одну й ту саму величину. При цьому якісна поведінка моделі та всі інші її кількісні характеристики залишаються постійними. Якщо коефіцієнт використовують як загальний множник, то відхилення вихідних результатів будуть пропорційні похибці його визначення. При цьому якісна поведінка моделі також залишається правильною. У більш складних випадках похибки вихідних даних можуть призводити до якісних змін у поведінці моделі. Розглянемо, наприклад, модель, задану у вигляді диференціального рівняння

$$\frac{dy}{dx} = ax^2 + bx + c, \quad (1.20)$$

для якої емпірично встановлено такі значення коефіцієнтів: $a = 2$; $b = 4$; $c = 2$. Для цих значень величина $\frac{dy}{dx} = 0$ в точці $x = (-1)$, у інших точках вона більша за нуль. Відповідно, функція $y(x)$ є зростаючою і має одну точку перегику, в якій її похідна дорівнює нулю. Істинні значення коефіцієнтів моделі відрізняються від емпірично встановлених. Нехай, наприклад, вони становлять $a = 1,9$; $b = 4,1$; $c = 1,9$. Тоді маємо дві точки $x_1 \approx (-1,484)$ та $x_2 \approx (-0,674)$, де похідна дорівнює нулю. При $x \in (-\infty, x_1) \cup (x_2, +\infty)$ функція зростає, а при $x \in (x_1, x_2)$ спадає. Відповідно, x_1 є точкою максимуму, а x_2 – точкою мінімуму функції $y(x)$. Якщо істинні значення коефіцієнтів моделі становлять $a = 2,14$; $b = 3,9$; $c = 1,9$, то похідна є додатною для всіх x , і функція не має точок екстремуму. Така різниця поведінки функції $y(x)$ може бути істотною з точки зору змістовної моделі системи. Зокрема, якщо $y(x)$ – потенційна енергія фізичної системи, то ми одержуємо три суттєво різні фізичні моделі. Залежно від істинних значень коефіцієнтів система може мати точки стійкої та нестійкої рівноваги, тільки точку нестійкої рівноваги або ж взагалі не мати точок рівноваги. Якщо похибка вихідних даних може призводити до якісно різних результатів моделювання, подальший аналіз такої моделі має сенс лише у випадках, коли ставиться завдання визначити можливі сценарії розвитку системи, її можливі стани тощо. Інакше необхідно підвищити точність вихідних даних, побудувати іншу модель або змінити завдання дослідження. Якщо погрішність вихідних даних дає можливість досягти мети моделювання, то наступним етапом є оцінка та порівняння погрішностей проміжних і підсумкових розрахунків. За результатами порівняння робиться висновок про збалансованість похибок, необхідність доробки алгоритму чи підвищення точності розрахунків на деякому етапі, якщо точність результатів не задовольняє дослідника, або про можливість спрощення алгоритму чи зменшення точ-

ності деяких розрахунків, коли одержувана на відповідному етапі точність є надмірною.

Після побудови математичної моделі необхідно визначити її адекватність. Для цього треба порівняти результати моделювання з емпіричними даними, одержаними при близьких умовах, а також з результатами, одержаними на інших моделях. Інколи для перевірки адекватності треба залучати незалежних експертів, які не брали участі в розробці моделі.

За результатами перевірки адекватності моделі приймають рішення щодо можливості її використання. Результатом перевірки може бути рішення про необхідність доробки (корегування) та оптимізації моделі. При корегуванні уточнюють перелік суттєвих параметрів моделі, обмеження, функціональні зв'язки між параметрами тощо. Під оптимізацією розуміють спрощення моделі при збереженні заданого рівня її адекватності. Основними критеріями оптимальності є витрати часу, пам'яті ЕОМ та інших ресурсів при використанні моделі.

У цьому посібнику не розглядаються основні методи аналітичного та чисельного дослідження математичних моделей, оскільки вони вивчалися раніше, зокрема в курсах математичного аналізу, алгебри та геометрії, диференціальних рівнянь, чисельних методів тощо. Особливості їх застосування до задач математичного моделювання розглядаються на конкретних прикладах у лабораторному практикумі.

2. СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

2.1. Метод Монте-Карло

Важливим класом задач математичного моделювання є задачі побудови статистичних моделей. Для їх вирішення широко використовують метод Монте-Карло (метод статистичних випробувань).

Метод Монте-Карло є обчислювальним методом розв'язування математичних задач за допомогою випадкових величин. Його особливістю є проста структура алгоритму обчислень. Загальна схема реалізації цього методу передбачає розбиття досліджуваного процесу на елементарні події, для яких може бути встановлено необхідні імовірнісні характеристики. Після цього здійснюють багаторазову прогонку елементарних подій, виконують частотний аналіз та обчислюють необхідні характеристики процесу, що вивчається. Іншою особливістю методу є його повільна збіжність. Як правило, вона пропорційна $\sqrt{1/N}$, де N – число випробувань. Тому ефективність методу тим вища, чим більшою є припустима похибка розрахунків. Зазвичай його використовують у випадках, коли припустима похибка не нижча за 1 %. Типовою помилкою при використанні методу Монте-Карло є прийняття висновків (особливо при кількісних дослідженнях) за недостатньою кількістю випробувань. Надмірно велика кількість випробувань може призводити до помилок іншого типу. Змістовні висновки при математичному моделюванні мають бути наслідками припущень вихідної змістовної моделі. Одержувані ж при великій кількості випробувань результати можуть виявитися наслідками деяких граничних теорем, що виконуються за будь-яких вихідних припущень.

Як правило, для однієї і тієї самої задачі можна розробити багато варіантів реалізації методу Монте-Карло, у яких моделюються різні випадкові величини. Це створює можливість обрання оптимального для дослідника варіанта з точки зору похибки розрахунків та використання ресурсів.

Найчастіше повторні випробування при незмінних умовах експерименту здійснюють для знаходження математичних сподівань випадкових величин. З імовірністю α математичне сподівання m_x знаходиться в інтервалі $[\bar{x} - \varepsilon; \bar{x} + \varepsilon]$, де $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$ – середнє значення, x_i – реалізація випадкової величини X у i -му випробуванні, N – кількість випробувань,

$\varepsilon = t_\alpha \sigma_x$, $\sigma_x^2 = \frac{\sigma_X^2}{N}$ – дисперсія \bar{x} , $\sigma_x^2 \approx S^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$ – дисперсія випадкової величини X , S – емпірична оцінка дисперсії. Звідси маємо: $\varepsilon = \frac{t_\alpha \sigma_X}{\sqrt{N}}$. Величини t_α знаходять з таблиць розподілу Стьюдента для заданої надійності α . Оскільки точність, з якою треба визначити математичне сподівання, задається, то для оцінки потрібної кількості випробувань можна використовувати вираз $N = \frac{t_\alpha^2 \sigma_X^2}{\varepsilon^2}$ або $N = \frac{t_\alpha^2 S^2}{\varepsilon^2}$ у разі, коли істинна дисперсія σ_x^2 є невідомою.

Метод Монте-Карло використовують також для знаходження невідомих ймовірностей p настання деяких випадкових подій. Для цього в N випробуваннях реєструють, скільки разів відбулася досліджувана подія, визначають її частоту d , яку й беруть за оцінку p . При заданих ε та α довірчим інтервалом є $[d - t_\alpha \sigma_d; d + t_\alpha \sigma_d]$. Дисперсія $\sigma_d^2 = \frac{p(1-p)}{N} \approx \frac{d(1-d)}{N}$. Точність ε оцінки ймовірності p дорівнює $\varepsilon = t_\alpha \sqrt{\frac{d(1-d)}{N}}$. Відповідно, кількість випробувань, що треба виконати для забезпечення точності ε при рівні надійності α , $N = \frac{t_\alpha^2 p(1-p)}{\varepsilon^2} \approx \frac{t_\alpha^2 d(1-d)}{\varepsilon^2}$. Звідси випливає, що для підвищення точності необхідно значно збільшити кількість випробувань. Інколи можна досягти тієї самої точності при меншій кількості випробувань. Нехай, наприклад, досліджувана частота є функцією якогось параметра системи χ : $p = f(\chi)$. Унаслідок дії закону великих чисел можна очікувати, що зі збільшенням N емпірична залежність $d = f(\chi)$ буде ставати все більш гладкою. Тоді, використовуючи відносно малу кількість випробувань, можна одержати емпіричні точки й потім побудувати апроксимуючу функцію, застосування якої дозволить зменшити кількість випробувань, потрібних для знаходження досліджуваної ймовірності p із заданою точністю.

Для реалізації методу Монте-Карло необхідно використовувати різноманітні алгоритми генерації послідовностей випадкових чисел та векторів. Деякі з них розглянуто нижче.

2.2. Рівномірні випадкові послідовності (РВП)

Щільність розподілу для випадкової величини, що має рівномірний розподіл на відрізку $[a, b]$, задається виразом:

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < a, \\ \frac{1}{b-a}, & \text{якщо } a \leq x \leq b, \\ 0, & \text{якщо } x > b. \end{cases} \quad (2.1)$$

Математичне сподівання цієї випадкової величини $m_x = \frac{a+b}{2}$, а її дисперсія $\sigma_x^2 = \frac{(b-a)^2}{12}$. Найчастіше у практиці використовують випадкові величини, що мають рівномірний розподіл на відрізках $[0, 1]$ або $[-1, 1]$. Для цих випадків щільність розподілу та його моменти дорівнюють відповідно:

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < 0; \\ \frac{1}{b-a}, & \text{якщо } 0 \leq x \leq 1; \\ 0, & \text{якщо } x > 1 \end{cases} \quad m_x = 0,5; \quad \sigma_x^2 = 1/12; \quad (2.2)$$

та

$$f(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < -1; \\ \frac{1}{b-a}, & \text{якщо } -1 \leq x \leq 1; \\ 0, & \text{якщо } x > 1. \end{cases} \quad m_x = 0; \quad \sigma_x^2 = 1/3; \quad (2.3)$$

Випадкову величину, що має рівномірний розподіл на відрізку $[0, 1]$, далі будемо позначати літерою ξ . Імовірність її потрапляння у деякий інтервал, що лежить усередині відрізку $[0, 1]$,

$$P(\alpha \leq \xi \leq \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} f(\xi) d\xi = \int_{\alpha}^{\beta} d\xi = \beta - \alpha, \quad (2.4)$$

тобто дорівнює довжині цього інтервалу. Цю властивість можна використовувати як необхідну й достатню умову того, що деяка випадкова величина має рівномірний розподіл на відрізку $[0, 1]$.

Генерування чергових реалізацій рівномірно розподіленої випадкової величини ξ можна здійснювати за допомогою такого перетворення:

$$\xi = z_1 \cdot 2^{-1} + z_2 \cdot 2^{-2} + \dots + z_i \cdot 2^{-i} + \dots, \quad (2.5)$$

де z_i – реалізація випадкової величини z , яка з рівною ймовірністю $p_z = 0,5$ може набувати значення 0 або 1.

Випадкова величина ξ може мати нескінченну кількість реалізацій. Але при запису чисел у ЕОМ використовується скінченна кількість двійкових розрядів. Тому кількість реалізацій випадкової величини, які можна використовувати при моделюванні, також буде скінченною. Максимальна кількість випадкових чисел, що записуються за допомогою k двійкових розрядів і не збігаються одне з одним, дорівнює 2^k . Із сукупності чисел $0, 1, 2, \dots, 2^k - 1$ можна одержати такі значення дискретної випадкової величини ξ :

$$\xi_i = \frac{i}{2^k - 1} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, 2^k - 1). \quad (2.6)$$

Їх імовірності дорівнюють $p_i = 1/2^k$. Розподіл такої випадкової величини є квазірівномірним. Моменти цього розподілу дорівнюють

$$m_i = \sum_{i=0}^{2^k-1} \frac{i}{2^k - 1} \cdot \frac{1}{2^k} = \frac{1}{2}; \quad \sigma_{\xi}^2 = \sum_{i=0}^{2^k-1} \frac{1}{2^k} \left(\frac{i}{2^k - 1} - \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{12} \cdot \frac{2^k + 1}{2^k - 1} \approx \frac{1}{12}. \quad (2.7)$$

Для генерування рівномірно розподілених послідовностей випадкових чисел застосовують табличний, фізичний та програмний способи. У першому випадку використовують таблиці випадкових величин, одержаних за допомогою фізичного або програмного генератора випадкових чисел. Такі таблиці можуть містити більш ніж 10^6 випадкових чисел. Таблиці використовують при ручних розрахунках, а також при налагодженні програм та перевірки особливо важливих розрахунків.

При фізичній генерації випадкових чисел можна використовувати довільний випадковий фізичний процес. Найчастіше користуються джерелами радіоактивного випромінювання або власними шумами електронних ламп. У першому випадку задається деякий проміжок часу Δt . Потім підраховується кількість k частинок, випромінених за час Δt . Значення ξ_i розраховуються за формулою 2.5. При цьому беруть

$$z_i = \begin{cases} 0, & \text{якщо } k - \text{ непарне,} \\ 1, & \text{якщо } k - \text{ парне.} \end{cases}$$

Проміжок Δt має бути достатньо великим, для того щоб імовірності одержання парних і непарних значень k були рівними з достатнім ступенем точності.

Якщо використовуються шуми електронних ламп, то необхідно спочатку побудувати залежність вихідної напруги від часу за достатньо великий проміжок часу (рис. 2.1).

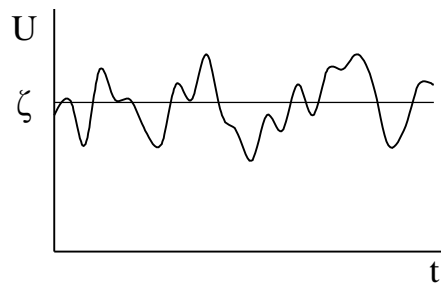


Рис.2.1

Після цього знаходять рівень відтинання ζ , для якого виконується умова $P(U > \zeta) = P(U < \zeta) = 0,5$. Значення випадкової величини z_i визначають через рівні проміжки часу Δt за умовою:

$$z_i = \begin{cases} 0, & \text{якщо } U(t_i) < \zeta, \\ 1, & \text{якщо } U(t_i) > \zeta. \end{cases}$$

Зазвичай використовують m таких генераторів, що працюють паралельно (m – кількість двійкових розрядів). Тоді на кожному такті здійснюється генерація одного m -розрядного числа. Одержувані таким методом послідовності можуть відрізнитися від рівномірної випадкової послідовності, якщо на вихідну характеристику впливають деякі неконтрольовані зовнішні фактори.

При використанні програмного методу генерування випадкових чисел значення $i + 1$ -го випадкового числа визначають, використовуючи значення i -го числа за рекурентною формулою $\xi_{i+1} = f(\xi_i)$. Завдяки цьому одержувані числа не є дійсно випадковими. Тому їх називають псевдовипадковими числами. Функція f має бути достатньо складною для того, щоб взаємозв'язок сусідніх елементів послідовності ξ_i та ξ_{i+1} не впливав на результати. Існує багато алгоритмів, які використовуються для генерації псевдовипадкових послідовностей рівномірно розподілених чисел. Розглянемо два з них.

Алгоритм фон Неймана. Нехай ξ_k є m -розрядним двійковим числом, що задовольняє умові $0 < \xi_k < 1$ і має вигляд

$$\xi_k = \varepsilon_1 \cdot 2^{-1} + \varepsilon_2 \cdot 2^{-2} + \dots + \varepsilon_m \cdot 2^{-m}. \quad (2.8)$$

Його квадрат може бути записаний у вигляді

$$\xi_k^2 = \delta_1 \cdot 2^{-1} + \delta_2 \cdot 2^{-2} + \dots + \delta_{2m} \cdot 2^{-2m}. \quad (2.9)$$

Будемо вважати m парним числом. Така умова завжди виконується для сучасних ЕОМ. Наступне псевдовипадкове число ξ_{k+1} одержимо, використовуючи коефіцієнти середніх членів ряду 2.9, за формулою

$$\xi_{k+1} = f(\xi_k) = \delta_{\frac{m}{2}+1} \cdot 2^{-1} + \delta_{\frac{m}{2}+2} \cdot 2^{-2} + \dots + \delta_{\frac{3m}{2}} \cdot 2^{-m}. \quad (2.10)$$

Одержувана за таким алгоритмом послідовність псевдовипадкових чисел за своїми властивостями є близькою до рівномірної випадкової послідовності. Але кількість малих чисел, що генеруються за алгоритмом фон Неймана, є дещо вищою, ніж це має бути для рівномірної випадкової послідовності.

Метод лишків. У цьому разі для одержання рівномірної послідовності псевдовипадкових чисел використовують рекурентне співвідношення $\xi_{k+1} = \{M\xi_k\}$, де хвилястими дужками позначено дробову частину числа. Як початкове значення ξ_0 можна обрати число 2^{-m} , де m є числом двійкових розрядів у мантисі комірки ЕОМ. M має бути достатньо великим цілим числом. Рекомендується використовувати $M = 5^{2p+1}$, де p є максимальним із цілих чисел, для яких виконується умова $5^{2p+1} < 2^m$.

У таблиці 2.1 подано деякі переваги та недоліки основних методів генерування випадкових чисел.

Після одержання рівномірної випадкової послідовності необхідно перевірити її якість. Використовують такі методи перевірки.

Перевірка за моментами розподілу. Для здійснення такої перевірки розраховують моменти одержаного розподілу:

$$m_\xi = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i; \quad \sigma_i^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i^2 - m_\xi^2. \quad (2.11)$$

Таблиця 2.1

**Переваги та недоліки основних методів генерування
випадкових чисел**

Метод	Переваги	Недоліки
Табличний	<ol style="list-style-type: none"> 1. Висока швидкість одержання чисел, якщо таблиця записана в ОЗП. 2. Можливість проведення повторних розрахунків. 3. Однократна перевірка якості рівномірної випадкової послідовності. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Потребує великого обсягу пам'яті в ОЗП. 2. Обмежений запас чисел. 3. Необхідність зовнішньої пам'яті.
Фізичний	<ol style="list-style-type: none"> 1. Висока швидкість генерування чисел. 2. Не потребує місця в ОЗП. 3. Необмежений запас випадкових чисел. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Неможливість повторних розрахунків. 2. Необхідно періодично корегувати датчик. 3. Потрібен спеціальний пристрій.
Програмний	<ol style="list-style-type: none"> 1. Потребує мало місця в ОЗП. 2. Можливість проведення повторних розрахунків. 3. Однократна перевірка якості рівномірної випадкової послідовності. 4. Не потребує зовнішніх пристроїв. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Порівняно низька швидкість генерації рівномірної випадкової послідовності. 2. Обмежений запас випадкових чисел.

Для рівномірної випадкової послідовності їх значення мають бути близькими відповідно до $1/2$ та $1/12$. Перевірку гіпотези про рівномірний розподіл можна здійснити за критерієм χ^2 . При обранні рівня значимості слід враховувати, яка помилка для конкретної задачі є більш суттєвою – прийняття помилкової гіпотези чи неприйняття правильної гіпотези.

Перевірка за гістограмою. У цьому разі відрізок $[0, 1]$ розбивають на n рівних частин. Потім підраховують емпіричні частоти трапляння чисел, що генеруються в одержані інтервали: $p_i = \frac{m_i}{N}$ (m_i – кількість чисел, що потрапили до i -го інтервалу, N – загальна кількість чисел у послідовності). Після цього будують гістограму розподілу. При великих N гістограма має наближатися до горизонтальної прямої $p = n/N$. Кількість відрізків розбиття та розмір послідовності визначаються конкретною задачею. У більшості випадків рекомендується обирати $n = 20 \dots 50$ та $N = (10^2 \dots 10^3)n$.

Перевірка на періодичність. Випадкові числа, що генеруються за програмним методом, рано чи пізно починають повторюватися. Якщо серед

елементів послідовності $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{q-1}$ немає однакових чисел, а елемент ξ_q збігається з одним із попередніх, то q називають відрізком аперіодичності. При використанні рівномірних випадкових послідовностей він має бути не меншим за кількість чисел, потрібну для здійснення розрахунків.

Перевірка на випадковість. Серед елементів послідовності, що генерується, може знайтись серія елементів $\xi_{k+1}, \xi_{k+2}, \dots, \xi_{k+r}$, які знаходяться в одній половині відрізка $[0, 1]$, і при цьому елементи ξ_k та ξ_{k+r+1} розміщуються в іншій половині цього відрізка. При використанні такої послідовності необхідно, щоб для кількості N чисел, що використовуються в розрахунках, виконувалася умова r_{\max} .

Перевірка в роботі. У цьому разі для перевірки якості генератора випадкових чисел будують імітаційну модель, результат роботи якої є відомим з теорії. Порівняння результатів моделювання з теоретичними висновками дає змогу зробити висновок про придатність генератора для розв'язування деякого класу задач.

2.3. Загальні методи генерування випадкових послідовностей із заданими законами розподілу

У практиці виникає необхідність генерування послідовностей випадкових чисел з довільними законами розподілу. Застосовують різні методи перетворення рівномірних випадкових послідовностей у послідовності з іншими законами розподілу. Найчастіше використовують таку властивість: якщо ξ – випадкова величина, рівномірно розподілена на відрізку $[0, 1]$, то випадкова величина X , що є розв'язком рівняння

$$\int_{-\infty}^x f(x) dx = \xi, \quad (2.12)$$

має щільність розподілу $f(x)$.

Нехай треба одержати послідовність чисел, рівномірно розподілених на відрізку $[a, b]$. Тоді необхідно для кожного елемента ξ_i рівномірної випадкової послідовності знайти розв'язок рівняння

$$\xi_i = \int_{-\infty}^{x_i} f(x) dx = \int_a^{x_i} \frac{dx}{b-a} = \frac{x_i - a}{b-a}. \quad (2.13)$$

Звідси маємо:

$$x_i = \xi_i(b-a) + a. \quad (2.14)$$

Для послідовності чисел, що мають експоненціальний розподіл:

$$f(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & \text{якщо } 0 \leq x < \infty; \\ 0, & \text{якщо } x < 0. \end{cases} \quad (2.15)$$

Звідси:

$$\xi_i = \int_{-\infty}^x f(x) dx = \int_0^{x_i} \lambda e^{-\lambda x} dx = 1 - e^{-\lambda x_i} \quad (2.16)$$

та

$$x_i = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - \xi_i). \quad (2.17)$$

Якщо величина ξ_i має рівномірний розподіл на $[0, 1]$, величина $1 - \xi_i$ також буде мати рівномірний розподіл на $[0, 1]$. Тому вираз (2.17) можна записати у вигляді

$$x_i = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi_i. \quad (2.18)$$

Такий спосіб не завжди є прийнятним. Зокрема, якщо з рівняння 2.12 неможливо одержати формулу для знаходження шуканого значення x у явному вигляді, часто більш доцільним є використання інших методів генерування послідовності випадкових чисел, що мають задану щільність розподілу $f(x)$.

Один із них (**метод відбору**) ґрунтується на використанні такої властивості. Нехай ξ_1 та ξ_2 – це чергові числа, які належать до рівномірної випадкової послідовності, заданої на відрізку $[0, 1]$. Зробимо перетворення

$$x' = \xi_1(b - a) + a; \quad y' = \xi_2 c. \quad (2.19)$$

Випадкові величини x' та y' мають рівномірний розподіл на відрізках $[a, b]$ і $[0, c]$ відповідно. Можна довести, що випадкова величина, яка визначається умовою $x = x'$, якщо $y' < f(x')$, має щільність розподілу $f(x)$. Для генерування випадкової послідовності, що має щільність розподілу $f(x)$, можна використовувати такий алгоритм.

Генерують чергові два числа рівномірної випадкової послідовності ξ_{2i-1} та ξ_{2i} . Потім розраховують відповідні значення x'_i та y'_i . Після цього перевіряють виконання умови $y'_i < f(x'_i)$. Якщо ця умова виконується, то

$x_k = x_i'$ є черговим випадковим числом послідовності, яку треба побудувати. Якщо умова не виконується, то переходять до перевірки наступної пари значень рівномірної випадкової послідовності.

Ще один спосіб генерування послідовності випадкових чисел із заданим розподілом ґрунтується на можливості наближення істинного розподілу рівномірним на досить малих відрізках. Нехай ми маємо функцію щільності розподілу $f(x)$, задану графічно на відрізку $[a, b]$. Розіб'ємо цей відрізок на n рівних частин так, щоб виконувалася умова:

$$\int_{a_0}^{a_1} f(x)dx = \int_{a_1}^{a_2} f(x)dx = \dots = \int_{a_{n-1}}^{a_n} f(x)dx = \frac{1}{n}, \quad (2.20)$$

де $a_0 = a$, $a_n = b$. При такому розбитті потрапляння випадкової точки на будь-який відрізок є рівномірним. У загальному випадку відрізки $[a_i, a_{i+1}]$ будуть нерівними. Апроксимуємо $f(x)$ такою східчастою функцією $\varphi(x)$, що для будь-якого відрізка розбиття виконується рівність:

$$\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(x)dx = \int_{a_i}^{a_{i+1}} \varphi(x)dx = \varphi_i (a_{i+1} - a_i) = \frac{1}{n}. \quad (2.21)$$

Тобто,

$$\varphi(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < a; \\ \frac{1}{n(a_{i+1} - a_i)}, & \text{якщо } x \in [a_i, a_{i+1}); \\ 0, & \text{якщо } x \geq b. \end{cases} \quad (2.22)$$

Координату випадкової точки M можна записати у вигляді:

$$x_M = a_i + \rho_M, \quad (2.23)$$

де a_i – координата лівого кінця інтервалу, в якому знаходиться точка, а ρ_M – його відстань до точки. Значення ρ утворюють рівномірну випадкову послідовність. Тому їх можна одержати за формулою

$$\rho = \xi(a_{i+1} - a_i). \quad (2.24)$$

На відміну від 2.14, ця формула не містить доданка a_i , оскільки значення ρ відраховуються саме від точки a_i .

Загальна схема побудови випадкової послідовності із заданою щільністю розподілу в даному випадку є такою. По-перше, визначають номер інтервалу, в якому знаходиться чергова точка M . Для цього знаходять черговий елемент ξ_{2j-1} рівномірної випадкової послідовності. Номер інтервалу i знаходять за формулою

$$i = \lfloor n\xi_{2j-1} \rfloor, \quad (2.25)$$

де квадратними дужками позначено цілу частину числа. Після цього генерують наступний елемент рівномірної випадкової послідовності ξ_{2j} і розраховують випадкове число

$$x = a_i + \xi_{2j}(a_{i+1} - a_i). \quad (2.26)$$

2.4. Спеціальні методи генерування випадкових послідовностей з деякими законами розподілу

Загальна формула 2.12 є незручною для генерування випадкових чисел з нормальним законом розподілу, оскільки призводить до необхідності розв'язування відносно x_i рівняння

$$\xi_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{x_i} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx. \quad (2.27)$$

Тому використовують інші методи. Один із найбільш поширених і простих методів ґрунтується на використанні центральної граничної теореми. Нехай ξ_i – елементи рівномірної випадкової послідовності, заданої на відрізку $[0, 1]$. Побудуємо з них послідовність

$$\alpha_i = 2\xi_i - 1. \quad (2.28)$$

Вона також буде рівномірною і випадковою, але заданою на відрізку $[-1, 1]$. Розрахуємо величину

$$\beta = \sum_{i=1}^n \alpha_i. \quad (2.29)$$

Згідно з центральною граничною теоремою, за достатньо великих n величина β буде мати близький до нормального розподіл з параметрами

$$m_{\beta} = M\left[\sum_{i=1}^n \alpha_i\right] = \sum_{i=1}^n M[\alpha_i] = 0; \quad (2.30)$$

$$\sigma_{\beta}^2 = D\left[\sum_{i=1}^n \alpha_i\right] = \sum_{i=1}^n D[\alpha_i] = \frac{n}{3}. \quad (2.31)$$

Величину $\gamma = \frac{\beta}{\sigma_{\beta}}$, що має нормальний розподіл з параметрами $m_{\gamma} = 0$ та $\sigma_{\gamma} = 1$, можна розрахувати за формулою

$$\gamma = \sqrt{\frac{3}{n}} \sum_{i=1}^n (2\xi_i - 1), \quad (2.32)$$

яка дає задовільні для практичного користування результати при $n \geq 8$.

У практиці математичного моделювання велике значення має можливість скорочення кількості обчислень. При генеруванні нормально розподілених величин для цього можна використовувати такі емпіричні формули:

$$\mu_k = \gamma_k - \frac{1}{20n} (3\gamma_k - \gamma_k^3) \quad (2.33)$$

та

$$\varsigma_k = \gamma_k - \frac{41}{13440n^2} (\gamma_k^5 - 10\gamma_k^3 + 15\gamma_k). \quad (2.34)$$

Використання (2.33) дає змогу скоротити величину n для обчислення γ_k до п'яти, а використання (2.34) – до двох.

Для одержання елементів нормальної послідовності використовують також перетворення

$$\gamma_j = \frac{\sum_{i=1}^k \xi_i - k/2}{\sqrt{k/12}}. \quad (2.35)$$

У практиці часто буває достатнім узяти $k = 12$.

Для одержання послідовності випадкових чисел v , що мають нормальний розподіл з параметрами $m_v = a$ та $\sigma_v = b$, необхідно зробити перетворення:

$$v_k = b\gamma_k + a. \quad (2.36)$$

Дві незалежні послідовності з нормальним законом розподілу й параметрами $(0, 1)$ можна одержати з двох незалежних випадкових послідовностей за допомогою перетворень:

$$\begin{cases} N_{1i} = (-2 \ln \xi_{1i})^{1/2} \sin(2\pi\xi_{2i}); \\ N_{2i} = (-2 \ln \xi_{2i})^{1/2} \cos(2\pi\xi_{1i}). \end{cases} \quad (2.37)$$

Застосування такого способу суттєво зменшує обсяг потрібних розрахунків завдяки тому, що один і той самий елемент кожної рівномірної послідовності використовується двічі.

Стисло зупинимося на методах побудови псевдовипадкових послідовностей з деякими іншими законами розподілу.

Чергові реалізації V_i випадкової величини, що має **розподіл Бернуллі** з параметром p (імовірність успіху), одержують з відповідних елементів рівномірної¹ послідовності, використовуючи таке перетворення:

$$V_i = \begin{cases} 1, \text{ якщо } \xi_i < p; \\ 0, \text{ якщо } \xi_i > p. \end{cases} \quad (2.38)$$

Реалізації G_i випадкової величини, що має **геометричний розподіл**, можна одержати з елементів рівномірної послідовності $\xi_i \in [0, 1]$ за таким алгоритмом. Черговий елемент G_i дорівнює значенню $\frac{\ln \xi_i}{\ln(1-p)}$, округленому в більший бік до найближчого цілого числа (p – імовірність успіху при одному випробуванні).

Реалізації V_j випадкової величини, що має **біноміальний розподіл** з параметрами n, p (n – кількість незалежних випробувань), можна одержати з елементів рівномірної послідовності $\xi_i \in [0, 1]$ за таким алгоритмом. Візьмемо перші n елементів рівномірної послідовності й перевіримо виконання умови $\xi_i < p$. Кількість елементів, для яких ця умова виконується, є першим елементом послідовності з біноміальним розподілом V_1 . Потім здійснюємо таку саму перевірку для наступних n елементів рівномірної послідовності й одержуємо другий елемент V_2 . Продовжуючи цю процедуру, одержуємо необхідну кількість елементів псевдовипадкової послідовності з біноміальним законом розподілу.

¹ Якщо не оговорено інше, під рівномірною послідовністю далі в цьому розділі ми будемо розуміти послідовність, елементи якої рівномірно розподілені на відріжку $[0, 1]$.

При малих p попередній алгоритм є не ефективним. У цьому разі можна застосовувати такий метод. Будемо послідовно додавати елементи псевдовипадкової послідовності, починаючи з першого, доки їх сума не перевищить n . Перший елемент послідовності з біноміальним розподілом дорівнюватиме кількості доданків мінус одиниця. Аналогічно одержуємо інші елементи біноміальної послідовності.

Реалізації Y_j випадкової величини, що має **від'ємний біноміальний розподіл** з параметрами x, p (x – кількість успіхів), можна одержати з елементів рівномірної послідовності $\xi_i \in [0, 1]$ за методом бракування. Підраховуємо кількість перших елементів рівномірної послідовності, які менше p . Нехай вона вперше стане рівною x після того, як ми врахуємо m -ий елемент. Тоді Y_1 дорівнюватиме кількості чисел ξ_i , які більші за p , серед перших m елементів рівномірної послідовності. Чергові елементи Y_j одержуємо за аналогічною процедурою, використовуючи наступні елементи рівномірної послідовності.

При малих p більш ефективним є алгоритм, що використовує таке перетворення:

$$Y_j = \sum_{i=1}^x G_i - x, \quad (2.39)$$

де G_i – елементи послідовності з геометричним законом розподілу.

Реалізації C_j випадкової величини, що має **розподіл Паскаля** з параметрами x, p , можна одержати, використовуючи перетворення

$$C_j = \sum_{i=1}^x G_i, \quad (2.40)$$

де G_i – чергові елементи послідовності з геометричним законом розподілу.

Реалізації P_i **розподілу Пуассона** одержують з відповідних елементів рівномірної послідовності за таким алгоритмом. Розраховують функцію розподілу $F(x)$ для $x = 0, 1, 2, \dots, N$ за формулою

$$F(x) = \sum_{k=0}^x \lambda^k \exp(-\lambda)/k!, \quad (2.41)$$

де λ – параметр розподілу (середнє), N має бути достатньо великим. Значення P_i вважають рівним x , для якого виконується умова $F(x) < \xi_i < F(x + 1)$. При малих λ для прискорення процедури використову-

ють спрощений алгоритм, згідно з яким значення P_i беруть рівним x , для якого виконується умова: $\xi_1 \xi_2 \dots \xi_{x+1} < e^{-\lambda} < \xi_1 \xi_2 \dots \xi_x$.

Реалізації N_j випадкової величини, що має **гіпергеометричний розподіл** з параметрами N , X , n (X – кількість елементів, що мають задану властивість, N – загальна кількість елементів у вибірці, n – кількість витягнутих без повернення елементів), можна одержати з елементів рівномірної послідовності $\xi_i \in [0, 1]$ за таким алгоритмом. Будемо вважати успіхом подію $\xi_i < p_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$), де

$$\begin{aligned} p_1 &= X/N; \\ N_1 &= N; \\ p_{i+1} &= (N_i p_i - d_i)/(N - i); \\ d_i &= \begin{cases} 0, & \text{якщо } \xi_i \geq p_i; \\ 1, & \text{якщо } \xi_i < p_i; \end{cases} \\ N_i &= N - i + 1. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Шуканим випадковим числом N_j буде кількість успіхів.

Чергові реалізації L_j **логономального розподілу** з параметрами m , σ ($m = \text{ехр}\mu$ – медіана, σ – стандартне відхилення для $\ln L$, μ – математичне сподівання для $\ln L$) можна одержати з елементів нормальної з параметрами $(0, 1)$ або рівномірної послідовностей за допомогою перетворень:

$$\begin{cases} L_j = m \exp(\sigma N_j); \\ L_j = m \exp\left[\sigma \left(\sum_{i=1}^{N_j} \xi_i - N_j\right)\right]. \end{cases} \quad (2.43)$$

Чергові реалізації X_j **розподілу χ^2** з v степенями вільності можна одержати з елементів незалежних рівномірної та нормальної з параметрами $(0, 1)$ послідовностей за допомогою таких перетворень.

Для парних v :

$$X_j = -\frac{1}{2} \ln \left(\prod_{i=1}^{v/2} \xi_i \right). \quad (2.44)$$

Для непарних v :

$$X_j = -\frac{1}{2} \ln \left(\prod_{i=1}^{(v-1)/2} \xi_i \right) + (N_j)^2. \quad (2.45)$$

Для $v = 1$:

$$X_j = (N_j)^2. \quad (2.46)$$

Чергові реалізації Π_i **розподілу Парето** з параметром форми c можна одержати з відповідних елементів рівномірної послідовності за допомогою перетворення

$$\Pi_i = (1/\xi_i)^{1/c}. \quad (2.47)$$

Чергові реалізації W_i **розподілу Вейбула** з параметрами масштабу b та форми c можна одержати з відповідних елементів рівномірної послідовності за допомогою перетворення

$$W_i = b(-\ln \xi_i)^{1/c}. \quad (2.48)$$

Чергові реалізації L_i **логістичного розподілу** можна одержати з відповідних елементів рівномірної послідовності за допомогою перетворення

$$L_i = a + k \ln \left(\frac{\xi_i}{1 - \xi_i} \right), \quad (2.49)$$

де a – параметр розміщення, $k = \sqrt{3}b/\pi$ – коефіцієнт масштабу, b – стандартне відхилення.

2.5. Моделювання багатовимірних випадкових векторів

N -вимірний випадковий вектор можна задати як сукупність його компонент $\mathbf{X} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$, де компоненти вектора η_i є випадковими величинами із заданим законом розподілу. Задачею моделювання є одержання послідовності чергових реалізацій випадкового вектора $X_1, X_2, \dots, X_i, \dots$ у вигляді послідовності чисел $(\eta_1^1, \eta_2^1, \dots, \eta_n^1)$, $(\eta_1^2, \eta_2^2, \dots, \eta_n^2)$, \dots , $(\eta_1^i, \eta_2^i, \dots, \eta_n^i)$, \dots . Якщо компоненти вектора є незалежними одна від іншої, то доцільно здійснювати генерування кожної компоненти як незалежної випадкової послідовності із заданим законом розподілу. Перед початком моделювання необхідно перевірити відсутність кореляції між генерованими сукупностями випадкових чисел.

Складнішою є задача моделювання випадкового вектора за наявності кореляції (залежності) між його компонентами. Кореляційну залежність

між компонентами нормального випадкового вектора можна задати у вигляді матриці других моментів

$$\mathbf{K} = \{\rho_{ij}\} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n), \quad (2.50)$$

де

$$\rho_{ij} = \begin{cases} \sigma_i^2, & \text{якщо } i = j; \\ M[(\eta_i - a_i)(\eta_j - a_j)], & \text{якщо } i \neq j. \end{cases} \quad (2.51)$$

Матриця \mathbf{K} є симетричною відносно головної діагоналі, оскільки $\rho_{ij} = \rho_{ji}$.

Нехай \mathbf{X} – це двовимірний випадковий вектор, компоненти якого η_1 і η_2 мають математичні сподівання a_1 і a_2 . Матриця других моментів має вигляд:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho \\ \rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix}, \quad (2.52)$$

де $\rho = \rho_{12} = \rho_{21}$.

Згенеруємо дві незалежні нормальні послідовності випадкових чисел μ_1 і μ_2 , математичні сподівання яких дорівнюють нулю, а дисперсії – одиниці. З них можна одержати дві нові нормальні послідовності за допомогою перетворень:

$$\begin{cases} \bar{\eta}_1 = a\mu_1; \\ \bar{\eta}_2 = b\mu_1 + c\mu_2. \end{cases} \quad (2.53)$$

Оберемо коефіцієнти a, b, c такими, щоб виконувалися умови:

$$M[\bar{\eta}_1^2] = \sigma_1^2; \quad M[\bar{\eta}_2^2] = \sigma_2^2; \quad M[\bar{\eta}_1\bar{\eta}_2] = \rho. \quad (2.54)$$

Враховуючи (2.53), одержимо:

$$\begin{cases} M[\bar{\eta}_1^2] = a^2 M[\mu_1^2] = a^2; \\ M[\bar{\eta}_2^2] = b^2 M[\mu_1^2] + 2bc M[\mu_1\mu_2] + c^2 M[\mu_2^2] = b^2 + c^2; \\ M[\bar{\eta}_1\bar{\eta}_2] = ab M[\mu_1^2] + ac M[\mu_1\mu_2] = ab. \end{cases} \quad (2.55)$$

Звідси маємо систему

$$\begin{cases} a^2 = \sigma_1^2; \\ b^2 + c^2 = \sigma_2^2; \\ ab = \rho, \end{cases} \quad (2.56)$$

розв'язком якої є:

$$a = \sigma_1, b = \frac{\rho}{\sigma_1}, c = \frac{\sqrt{\sigma_1^2 \sigma_2^2 - \rho^2}}{\sigma_1}. \quad (2.57)$$

Тому:

$$\begin{cases} \bar{\eta}_1 = \sigma_1 \mu_1; \\ \bar{\eta}_2 = \frac{\rho}{\sigma_1} \mu_1 + \frac{\sqrt{\sigma_1^2 \sigma_2^2 - \rho^2}}{\sigma_1} \mu_2. \end{cases} \quad (2.58)$$

Реалізації вихідних випадкових величин η_1 і η_2 можна одержати за допомогою перетворень:

$$\begin{cases} \eta_1 = \bar{\eta}_1 + a_1; \\ \eta_2 = \bar{\eta}_2 + a_2. \end{cases} \quad (2.59)$$

Для тривимірного випадкового вектора (η_1, η_2, η_3) матриця других моментів має вигляд:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{12} & \sigma_2^2 & \rho_{23} \\ \rho_{13} & \rho_{23} & \sigma_3^2 \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Реалізації тривимірного випадкового вектора можна одержати за допомогою перетворень:

$$\begin{cases} \eta_1 = \bar{\eta}_1 + a_1 = a\mu_1 + a_1; \\ \eta_2 = \bar{\eta}_2 + a_2 = b\mu_1 + c\mu_2 + a_2; \\ \eta_3 = \bar{\eta}_3 + a_3 = d\mu_1 + e\mu_2 + f\mu_3 + a_3, \end{cases} \quad (2.61)$$

де μ_1, μ_2, μ_3 – незалежні нормально розподілені випадкові послідовності, для яких математичні сподівання дорівнюють нулю, а дисперсії – одиниці.

Другі моменти розподілу дорівнюють:

$$\begin{cases} M[\bar{\eta}_1^2] = M[a^2\mu_1^2] = a^2; \\ M[\bar{\eta}_2^2] = M[b^2\mu_1^2 + 2bc\mu_1\mu_2 + c^2\mu_2^2] = b^2 + c^2; \\ M[\bar{\eta}_3^2] = M[d^2\mu_1^2 + e^2\mu_2^2 + f^2\mu_3^2 + 2de\mu_1\mu_2 + 2df\mu_1\mu_3 + 2ef\mu_2\mu_3] = \\ \qquad \qquad \qquad = d^2 + e^2 + f^2; \\ M[\bar{\eta}_1\bar{\eta}_2] = M[ab\mu_1^2 + ac\mu_1\mu_2] = ab; \\ M[\bar{\eta}_1\bar{\eta}_3] = M[ad\mu_1^2 + ae\mu_1\mu_2 + af\mu_1\mu_3] = ad; \\ M[\bar{\eta}_2\bar{\eta}_3] = M[bd\mu_1^2 + be\mu_1\mu_2 + bf\mu_1\mu_3 + cd\mu_1\mu_2 + ce\mu_2^2 + cf\mu_2\mu_3] = bd + ce. \end{cases} \quad (2.62)$$

Звідси одержуємо систему шести рівнянь з шістьма змінними:

$$\begin{cases} a^2 = \sigma_1^2; \\ b^2 + c^2 = \sigma_2^2; \\ d^2 + e^2 + f^2 = \sigma_3^2; \\ ab = \rho_{12}; \\ ad = \rho_{13}; \\ bd + ce = \rho_{23}, \end{cases} \quad (2.63)$$

розв'язуючи яку можна знайти коефіцієнти a, b, c , необхідні для побудови тривимірного випадкового вектора (η_1, η_2, η_3) .

3. ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Як правило, природні, технічні, соціально-економічні, екологічні та інші реальні системи і процеси є досить складними. Тому звичайні аналітичні методи не завжди дають можливість побудувати їх адекватні моделі. У такому разі альтернативою може бути використання імітаційних моделей. Загальна схема імітаційного моделювання передбачає розбиття досліджуваної системи або досліджуваного процесу на елементарні системи й події, для яких можливий достатньо повний математичний опис, і наступну побудову з них модельної системи або модельного процесу, для яких властивості, що цікавлять дослідника, можуть бути описані через властивості елементарних систем і подій. Сутність імітаційного моделювання полягає у відтворенні елементарних подій і розрахунку на його основі нових властивостей досліджуваних систем і процесів. Імітаційне моделювання становить основу методу обчислювального експерименту, який дає змогу замінити експерименти з реальними системами та процесами у випадках, коли останні є неможливими, небезпечними або дуже дорогими.

3.1. Основні етапи імітаційного моделювання

На першому етапі необхідно визначити й проаналізувати завдання дослідження. Це передбачає встановлення та обґрунтування мети дослідження, розбиття основного завдання на окремі задачі, з'ясування областей можливого застосування результатів і особливостей їх використання.

Надалі необхідно розробити методологію виконання завдання дослідження. На цьому етапі встановлюють пріоритети та послідовність розв'язування окремих задач, визначають можливі методи їх розв'язування, оцінюють потрібні ресурси (витрати праці, часу, пам'яті ЕОМ тощо), складають сітьовий план виконання робіт. Встановлення пріоритетності критеріїв є нетривіальною задачею вибору. Основними методами її вирішення є методи, ґрунтовані на використанні критеріальної мови, мови бінарних відношень та експертних оцінок.

Далі треба встановити вимоги до інформації, що необхідна для дослідження, зокрема визначити:

- яка саме інформація потрібна;
- як її можна отримати;
- у якому вигляді необхідно подати вихідні дані;
- яка точність даних потрібна;
- які методи можна застосовувати для обробки інформації.

Наступним етапом роботи є збирання потрібної інформації. Її можна отримати з фахової літератури, звітів та інших документів різноманітних установ та організацій, шляхом консультацій у фахівців тощо. У разі від-

сутності потрібної інформації може виникнути необхідність проведення попередніх експериментів з реальними моделями або розробки додаткових математичних моделей. Зазвичай прагнуть зібрати максимально можливий обсяг даних, оскільки на початку дослідження неможливо точно встановити, яка саме інформація буде використовуватися далі, а яка залишиться незатребуваною.

Зібрану інформацію треба відсортувати за достовірністю, точністю, задачами, для розв'язування яких її планують використовувати, тощо. Необхідно також перевірити наявність суперечності між одержаними даними. Якщо вона є, треба спробувати визначити її причини й усунути суперечність шляхом відбраковування недостовірних даних або їх корегування. Якщо визначити причини суперечності даних неможливо, треба спробувати побудувати таку модель, у якій ці дані не будуть використовуватися. Якщо це також неможливо, то після побудови моделі необхідно перевірити вплив сумнівних даних на результати моделювання. При такій перевірці зазвичай змінюють ці дані від мінімально можливих до максимально можливих значень і визначають, чи виявляє така зміна суттєвий вплив на одержувані результати.

Зібрана інформація не завжди має вигляд, придатний для безпосереднього використання при моделюванні. Тому часто виникає необхідність її попередньої обробки. Така обробка може полягати у групуванні, класифікації, визначенні статистичних характеристик, інтерполяції, екстраполяції, апроксимації тощо.

Наступним етапом є висування гіпотез і прийняття припущень. Потреба в цьому виникає тоді, коли наявної інформації недостатньо для розробки імітаційної моделі або досягнення мети моделювання. Зокрема, можуть бути невідомими побудова й властивості деяких підсистем досліджуваної системи, окремі зв'язки між її елементами, умови функціонування системи тощо.

Гіпотези використовують при довизначенні завдань дослідження як заміну невідомих закономірностей функціонування і характеристик системи, закономірності її взаємодії із зовнішнім середовищем, а також можливі результати дослідження. Наприклад, часто буває невідомим, але важливим для обрання методів дослідження та висновків характер залежностей, що використовують або досліджують при моделюванні, чи є вони обмеженими, неперервними, гладкими, монотонними, унімодальними тощо.

Припущення роблять для заміни невідомих даних, а також у випадках, коли для використання в моделі наявні дані треба спростити або скоротити. Типовими припущеннями, що робляться при імітаційному моделюванні, є можливість ігнорування впливу окремих факторів на результат моделювання, заміна відомих нелінійних залежностей лінійними, викори-

стання для наближення відомих залежностей ступеневих та тригонометричних рядів з обмеженою кількістю членів тощо.

Гіпотези та припущення має бути узгоджено з іншими даними, що використовуються, а також з наявною інформацією про поведінку й особливості об'єкта дослідження та його окремих підсистем, ресурсами, що їх може застосовувати дослідник, тощо.

3.2. Побудова концептуальної моделі

Зміст концептуальної моделі включає опис досліджуваної системи, зовнішнього середовища, зв'язків усередині досліджуваної системи та між системою і зовнішнім середовищем, цільову функцію, обмеження задачі та наявні ресурси. Необхідно також встановити сталі параметри та змінні моделі. Змінні моделі в загальному випадку можна розподілити на три групи – випадкові величини, регульовані величини, або керуючі параметри, та нерегульовані величини. Опис кожного параметра або змінної має містити найменування та символ (означення), зміст (фізичний, економічний тощо), одиниці вимірювання, діапазон можливих значень, характеристики (регульована, нерегульована або випадкова змінна, однозначна або багатозначна величина тощо), місце використання в моделі, джерело параметра (вихідна величина або проміжний результат).

Опис системи передбачає визначення та опис важливих для подальшого моделювання підсистем та елементів. Опис підсистем та елементів має містити їх найменування, дані про їх зв'язок з іншими підсистемами та елементами, а також зовнішнім середовищем, параметри та змінні, що їх характеризують, характеристики (активні або пасивні, стабільні або нестабільні тощо). Опис зовнішнього середовища включає дані про параметри й змінні, що його характеризують, елементи та підсистеми, через які реалізується зв'язок досліджуваної системи із зовнішнім середовищем, його характеристики.

Опис кожного зв'язку має містити інформацію про елементи, між якими він діє, його спрямованість, якісні характеристики (детермінованість або кореляція, прямий або непрямий тощо), фізичні, хімічні, економічні та інші закони, що визначають зв'язок, математичний опис зв'язку тощо.

Після розробки концептуальну модель попередньо аналізують у послідовності, зворотній до послідовності її побудови. На цьому етапі перевіряють та уточнюють основні елементи, гіпотези й припущення моделі, вихідні дані, математичні моделі елементарних подій та зв'язків тощо. Іншим способом перевірки концептуальної моделі є її розгляд фахівцями, які не брали участі в розробці цієї моделі. Результатом перевірки може бути висновок про доцільність використання моделі, необхідність її уточнення та доробки, помилковість моделі або недоцільність її використання через обмеження ресурсів дослідження.

3.3. Логічні структурні схеми імітаційних моделей

Після прийняття рішення про можливість використання концептуальної моделі необхідно побудувати логічну структурну схему (блок-схему) імітаційної моделі. Логічна структурна схема моделі є впорядкованим та наочним представленням процесу моделювання, в якому визначено не тільки дії, що їх треба виконувати під час дослідження, але також і порядок їх виконання. На її підґрунті створюють операторну схему, в якій будь-яка процедура записується у вигляді послідовності елементарних операцій, що її реалізують. Зазвичай логічну структурну схему розробляють фахівці тієї галузі, до якої належить об'єкт дослідження, а операторну схему – фахівці з програмування. Це призводить до необхідності достатньо повного опису всіх специфічних функцій та процедур у логічній структурній схемі.

Логічну структурну схему рекомендується будувати як сукупність стандартних модулів (блоків). Це забезпечує гнучкість моделі, можливість її вдосконалення й доробки шляхом внесення поправок до окремих модулів або додавання нових модулів. Це також дає можливість при постановці обчислювальних експериментів вносити зміни до одного чи декількох модулів без необхідності відповідного корегування інших.

Розрізняють основні та допоміжні модулі.

Основні модулі відображають специфічні функції досліджуваних систем та процесів. Їх прикладами можуть бути модуль побудови календарного плану в моделі календарного планування, модуль розрахунку елементарного акту хімічної реакції при моделюванні хімічних процесів, модуль розрахунку вільної енергії системи при моделюванні термодинамічної рівноваги тощо.

Допоміжні модулі не відображають специфічні функції та властивості об'єкта дослідження і можуть використовуватися в різних імітаційних моделях. Прикладами таких модулів є модулі генерації випадкових чисел, статистичної обробки даних, пошуку екстремумів функцій, обчислення визначників матриць тощо.

Зазвичай побудова імітаційної моделі здійснюється за ієрархічним принципом з поступовим підвищенням рівня деталізації. Спочатку розробляють укрупнену структурну схему імітаційної моделі, яка відображає досліджувані системи та процеси в узагальненому вигляді і представляє загальний порядок дій під час моделювання. Нехай, наприклад, нам треба розробити імітаційну модель фінансового плану університету. Укрупнена схема такої моделі може складатися з трьох основних модулів:

- модуль розрахунку доходів;
- модуль розрахунку витрат;
- модуль порівняння витрат і доходів.

Далі здійснюється деталізація модулів. Наприклад, для розрахунку витрат необхідно відокремити підмодулі розрахунків:

- заробітної плати;
- податків та обов'язкових зборів;
- комунальних платежів;
- адміністративних витрат;
- витрат на придбання обладнання;
- витрат на придбання літератури;
- витрат на ремонт та експлуатацію приміщень;
- витрат на відрядження;
- витрат на видання методичної, навчальної та наукової літератури;
- інших витрат.

При подальшій деталізації виникає розбіжність між різними типами моделей.

Наприклад, ми можемо здійснювати її, доки не одержимо елементарні модулі, для яких є можливим достатньо повний математичний опис. Такими модулями можуть бути:

- розрахунок заробітної плати доцентів, яка дорівнюватиме добутку кількості доцентів на посадовий оклад доцента та на кількість місяців у розрахунковому періоді;
- розрахунок витрат на придбання комп'ютерного класу, які дорівнюватимуть добутку кількості комп'ютерів заданої конфігурації на вартість одного комп'ютера, й тому подібне.

Завданням моделювання може бути прогнозування розвитку університету на деякий період часу. Багато параметрів, які потрібні для таких розрахунків, можуть змінюватися протягом досліджуваного періоду або є невідомими. Зокрема, невідомо, чи буде у продажу протягом розрахункового періоду той чи інший підручник. Якщо буде, то скільки він коштуватиме. Невідомо, чи будуть змінюватися тарифи на комунальні послуги і як саме вони будуть змінюватися. Тому виникає необхідність якось оцінити межі можливих коливань параметрів або уникнути необхідності їх використання.

Для оцінки меж коливань параметрів доцільно використовувати метод екстраполяції або експертні оцінки. У першому разі необхідно зібрати інформацію про динаміку зміни відповідного параметра за достатньо великий проміжок часу, потім підібрати придатний для розв'язування конкретної задачі метод екстраполяції або апроксимації одержаної залежності і визначити можливі значення параметра в необхідний момент часу. Проте у багатьох випадках використання екстраполяції є недоцільним або неможливим. Є параметри, залежності яких від часу можна наближати неперервними функціями. Наприклад, курс долара США відносно гривні змінюється щоденно. Порівняно із розрахунковим періодом, який для задачі, що

розглядається, становить від кількох місяців до кількох років, це достатньо малий проміжок часу, тому заміна дискретної функції на неперервну не призведе у цьому випадку до суттєвої похибки. Водночас є параметри, для яких це принципово неможливо. Наприклад, тарифи на комунальні послуги, посадові оклади та інші подібні величини змінюються зазвичай один раз на рік або ще рідше. Тобто період, протягом якого ці параметри утримуються сталими, є порівняним або більшим за розрахунковий. У цьому разі екстраполяція є неможливою. Крім того, використання методу екстраполяції може виявитися занадто складним або дуже дорогим, якщо в розробників моделі відсутні необхідні дані.

Альтернативою методу екстраполяції є експертне оцінювання меж можливих коливань параметрів моделі. Зазвичай метод експертних оцінок вважається трудомістким та вартісним. Але у простих випадках експертами можуть бути розробники та замовники моделі, що суттєво спрощує і здешевлює його реалізацію.

У багатьох випадках більш доцільним є уникнення використання невідомих параметрів. Наприклад, це може бути зумовлено накопиченням помилок при розрахунках, що призводить до неможливості формулювання змістовних висновків за результатами моделювання, або суттєвим ускладненням моделі, зростанням потрібних ресурсів тощо.

Часто є можливість задати значення деяких параметрів чи проміжних результатів або межі коливань цих значень. Зокрема, у прикладі, що розглядається, можна задати обмеження на деякі види витрат (придбання літератури, обладнання, ремонт приміщень та інші) у вигляді конкретних сум або у відсотковому відношенні до загального доходу чи загальних витрат.

Іноді є можливість уникнення необхідності використання невідомих параметрів шляхом зміни окремих блоків, де вони мали б використовуватися. Така зміна може здійснюватися шляхом використання відомих аналітичних виразів для розрахунку величин, знаходження яких у початковому варіанті моделі передбачало необхідність використання невідомих параметрів. Наприклад, для моделювання броунівського руху частинок необхідно знати швидкості окремих частинок у довільний момент часу. Їх можна знайти шляхом безпосереднього застосування законів динаміки. Але якщо система є рівноважною з точки зору термодинаміки, можна використовувати метод Монте-Карло й відомий аналітичний вираз розподілу Максвелла. В інших випадках можна спробувати замінити аналітичні вирази, що застосовують одні параметри, на вирази, що використовують інші. Зокрема, у класичній механіці одні й ті самі характеристики системи можна знайти, використовуючи закони Ньютона, закони збереження або принцип найменшої дії. Той чи інший підхід обирають виходячи з відомих параметрів конкретної задачі.

У практиці, як правило, використовують комбінацію всіх розглянутих методів. Тобто, частину модулів деталізують, доки не одержують достатньо повного математичного опису всіх необхідних елементів і подій. Інші модулі не деталізують, а задають необхідні для них параметри.

Повна логічна структурна схема імітаційної моделі має надавати повне відображення концептуальної моделі й містити докладний опис усіх модулів та підмодулів. У ній треба ясно відобразити логіку моделі, напрямки гілок схеми, а також задати в явному вигляді всі потрібні математичні рівняння, нерівності, формули тощо.

Для опису логічної структурної схеми використовують спеціальні символи. Деякі з них наведено на рис. 3.1.

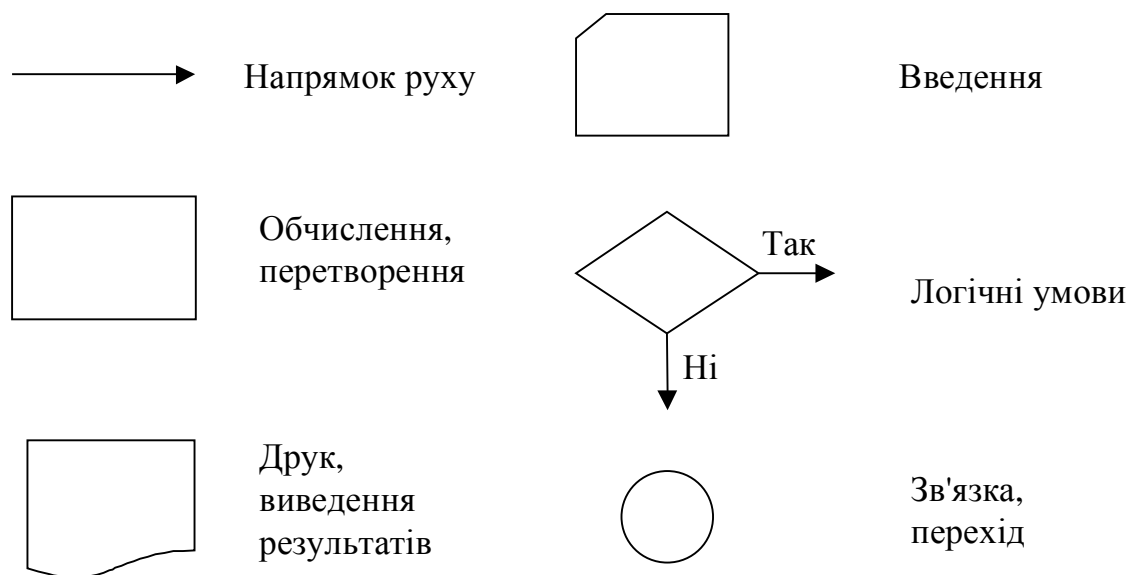


Рис. 3.1. Символи логічних структурних схем

На рис. 3.2 наведено укрупнену логічну структурну схему, що відповідає моделі розрахунку фінансового балансу.

При побудові логічних структурних схем велике значення має організація циклічної роботи окремих блоків алгоритму. У схемах цикли позначають шестикутниками (рис. 3.3), де вказують індекс, за допомогою якого організують цикл та межі його змінювання.

Після побудови структурної схеми моделі перевіряють її логічну повноту та послідовність. Для цього послідовно виконують такі операції.

1. Перевірка повноти логічної структурної схеми, тобто наявності в ній усіх функцій, передбачених концептуальною моделлю.

2. Порівняння кожної функції концептуальної моделі з її реалізацією в логічній схемі, тобто перевірка того, чи відповідатиме результат виконання функції в логічній схемі результату, передбачуваному концептуальною моделлю.

3. Перевірка наявності в логічній схемі функцій, відсутніх у концептуальній моделі.

4. Перевірка наявності входів та виходів у структурній схемі в цілому та в окремих її модулях та підмодулях.

5. Порівняння вхідних та вихідних величин структурної схеми в цілому та окремих її елементів з передбаченими концептуальною моделлю.

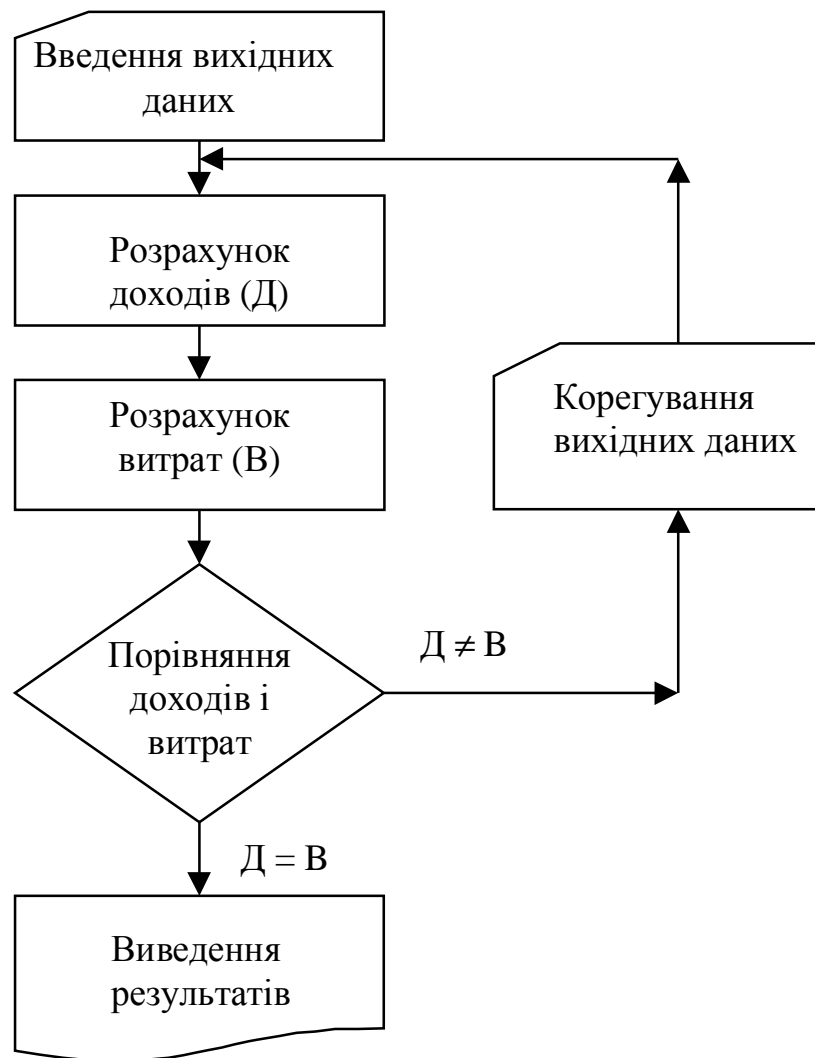


Рис. 3.2. Логічна структурна схема імітаційної моделі розрахунку фінансового балансу

6. Перевірка правильності запису й використання математичних виразів.

7. Перевірка одиниць вимірювання всіх використовуваних величин. Особливу увагу при цьому слід приділити відповідності цих одиниць, а також форм запису математичних виразів обраній системі одиниць вимірювання.

8. Перевірка правильності значень усіх заданих констант і параметрів.

9. Перевірка правильності використання індексів.

10. Перевірка правильності задання функцій датчиками і стандартними підпрограмами.

11. Перевірка правильності роботи генераторів випадкових чисел.

12. Перевірка правильності реалізації математичних виразів у всіх елементах схеми.

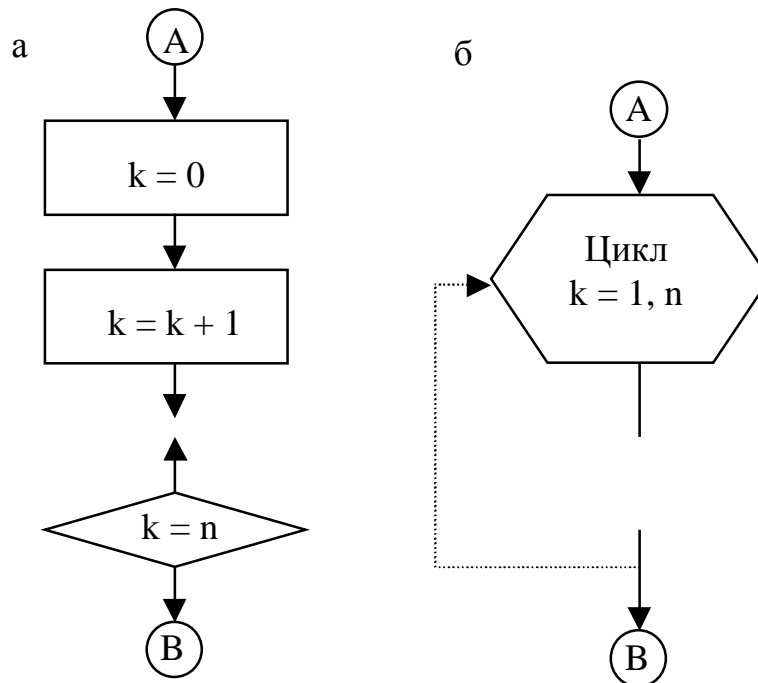


Рис. 3.3. Схема організації циклів: а – повна, б – символічна

3.4. Операторні схеми імітаційних моделей

Недоліком логічної структурної схеми є її громіздкість. Тому для опису імітаційних моделей часто використовують операторні схеми. Вони є менш наочними, проте більш компактними, ніж логічні структурні схеми.

При запису операторних схем використовують такі означення:

А – арифметичний (обчислювальний) оператор;

Ф – оператор детермінованого формування (детермінована функція);

Ф – оператор випадкового формування;

Р – логічний оператор;

К – лічильник циклів;

П – друк (вивід) результатів;

Я – зупинення роботи.

Основні правила написання операторних схем є такими:

- номер оператора записується як правий нижній індекс, наприклад, А₆;

- якщо k -му оператору управління передається після виконання операторів з номерами l, m , це позначається за допомогою лівих верхніх індексів, наприклад, ${}^{l,m}F_k$; якщо ж управління k -му оператору передається безпосередньо після виконання $k - 1$ -го оператора, то ліві верхні індекси не використовують;

- запис $P_n \uparrow^m$ означає, що при виконанні умови, яку перевіряє оператор, треба перейти до оператора з номером m , у противному разі – до оператора з номером $n + 1$;

- запис $P_n \downarrow_m$ означає, що при виконанні умови, яку перевіряє оператор, треба перейти до оператора з номером $n + 1$, у противному разі – до оператора з номером m ;

- запис $P_n \uparrow^m \downarrow_k$ означає, що при виконанні умови, яку перевіряє оператор, треба перейти до оператора з номером m , у противному разі – до оператора з номером k .

Як приклад наведемо операторну схему запису алгоритму генерування n випадкових чисел з щільністю розподілу $f(x)$ за методом відбору, описаним у розділі 2.3. Будемо використовувати такі означення операторів:

F_1 – формує $i = 0$;

F_2 – формує $k = 0$;

K_3 – лічильник випадкових чисел ($k = k + 1$);

F_4 – формує $i = i + 1$;

Φ_5 – генерує випадкове число ξ_{2i-1} , що належить до рівномірної випадкової послідовності, заданої на відрізку $[0, 1]$;

A_6 – розраховує величину $x' = \xi_{2i-1}(b - a) + a$;

Φ_7 – генерує випадкове число ξ_{2i} , що належить до рівномірної випадкової послідовності, заданої на відрізку $[0, 1]$;

A_8 – обчислює величину $y = c\xi_{2i}$;

P_9 – перевіряє виконання умови $y < f(x')$;

F_{10} – формує випадкове число $x_k = x'$;

P_{11} – перевіряє виконання умови $k = n$;

Π_{12} – друкує результати;

$Я_{13}$ – зупиняє роботу програми.

Операторна схема алгоритму для цього випадку має вигляд:

$F_1 F_2^{2,11} K_3^{3,9} F_4 \Phi_5 A_6 \Phi_7 A_8 P_9 \downarrow_4 F_{11} P_{11} \downarrow_3 \Pi_{12} Я_{13}$.

3.5. Реалізація імітаційних моделей

Розрізняють два основні способи реалізації імітації динаміки досліджуваних систем.

У способі однорідного групування за часом задають постійний приріст часу. При цьому весь досліджуваний проміжок часу розбивається на

певну хронологічно впорядковану множину рівних відрізків. Під час моделювання всі обчислювальні процедури виконують послідовно для кожного відрізка часу. Якщо деякі з подій, що відбуваються протягом k -го відрізка часу, мають наслідки, які треба враховувати у майбутньому, то відповідну інформацію зберігають у пам'яті ЕОМ і за необхідності звертаються до неї.

Можливі процеси, в яких спостерігаються швидкі зміни досліджуваних систем протягом окремих нетривалих проміжків часу і відносно повільні зміни в інший час. У такому разі розбивати весь досліджуваний період часу на рівні відрізки недоцільно. Якщо обрати ці відрізки малими, це призведе до невиправданого збільшення потрібних ресурсів. Якщо ж їх зробити великими, буде втрачено або спотворено важливу інформацію про події, що відбуваються під час швидкої зміни системи. Для моделювання таких процесів більш доцільним є спосіб неоднорідного групування за часом. Моделювання процесу при використанні цього способу здійснюється від події до події. Можливе також використання схеми, описаної у попередньому випадку, доповненої корегуванням наступного відрізка часу за приростами значень досліджуваних параметрів, які одержали на поточному відрізку.

3.6. Імітаційна модель управління запасами

Як приклад розглянемо імітаційну модель управління запасами².

Існує низка факторів, які призводять до необхідності створення запасів ресурсів. Серед них можна вказати різницю ритмів постачання й використання ресурсів. Наприклад, постачання деякого виду ресурсу може здійснюватися щотижнево, а його використання – щоденно. Іншим фактором є випадковість обсягів та моментів постачання і використання ресурсів. Зокрема, в агропромисловому комплексі, будівництві і деяких інших галузях використання ресурсів суттєво залежить від погодних умов. При нестійкому економічному розвитку постачання й використання ресурсів пов'язане з отриманням необхідних коштів. З іншого боку, збільшення запасів призводить до додаткових витрат, пов'язаних із використанням складів, зменшенням оборотних коштів, частковою втратою ресурсів під час їх зберігання тощо. Тому виникає задача оптимізації запасів.

Розглянемо однопродуктову систему управління запасами. Кількість продукту, що видається зі складу протягом доби, визначається поточним попитом. Якщо рівень запасу у стає меншим за деяке визначене значення h , оформлюють замовлення на постачання продукту в обсязі q . Загальний період, для якого здійснюється моделювання, дорівнює T . Будемо вважа-

² Ситник В.Ф. Основы научных исследований.- К.: Вища школа, 1978.

ти, що добовий попит на продукт X є випадковою невідомою величиною з відомим законом розподілу.

Послідовність виконання операцій протягом доби є такою. Спочатку підраховують обсяг постачання продукту зі складу протягом даної доби. Потім здійснюють постачання. Далі оцінюють залишок продукту і в разі необхідності оформлюють замовлення на поповнення запасу. Кількість днів між моментами подання замовлення на постачання та його виконанням λ є випадковою величиною. Незадоволені замовлення споживачів анулюються, тобто не припускається перенесення виконання замовлень на наступну добу. Якщо поточний рівень запасу досягає граничного значення h , то оформлюють замовлення обсягу q на його поповнення. Але це роблять лише у разі виконання поданого раніше замовлення. Тобто, у кожний момент часу не можна реалізувати більше ніж одне замовлення. Вартість постачання будемо вважати незалежною від обсягу поставки і рівною g , а вартість зберігання – приблизно пропорційною обсягу запасу. При розрахунках можна вважати, що вартість зберігання протягом доби пропорційна залишку запасу на кінець попередньої доби. Якщо склад не зможе задовольнити якесь замовлення, він має сплатити штраф. Сума сплаченого протягом доби штрафу пропорційна підсумковій величині дефіциту ресурсу на кінець відповідної доби.

Цільовою функцією можуть бути сумарні витрати системи постачання протягом розрахункового періоду. Оскільки щодобовий попит і затримка постачання є випадковими величинами, сумарні витрати також будуть випадковою величиною. Тому як цільову функцію зазвичай обирають математичне сподівання витрат. Завданням імітаційного моделювання є знаходження оптимальних значень h^* та q^* , які забезпечують мінімум цільової функції.

Позначимо:

L – сумарні витрати;

$L_{зб}$ – витрати на зберігання;

$L_{п}$ – витрати на постачання;

$L_{шт}$ – витрати на сплату штрафів;

t – поточний час;

t' – момент часу, коли здійснюється постачання;

y – поточний обсяг запасу;

j – лічильник циклів;

s – витрати на зберігання одиниці продукту протягом доби;

p – витрати на сплату штрафів за невиконання замовлення у розрахунку на одиницю продукту;

z – початковий рівень запасу;

$F(x)$ – функція розподілу ймовірності попиту;

$F(\lambda)$ – функція розподілу ймовірності затримки постачання.

Логічну структурну схему імітаційної моделі, що реалізує N повторних випробувань при фіксованих значеннях q та h , подано на рис. 3.4.

Моделювання починається з введення некерованих параметрів, фіксованих значень змінних керування та кількості циклів N . Потім змінним стану системи $L_{зб}$, $L_{п}$, $L_{шт}$, t , t' присвоюються нульові значення. Оператори 2, 13 та 14 організовують зовнішній цикл роботи алгоритму, що забезпечує N -кратне повторювання випробувань за ідентичних умов. Оператор 4 задає початковий запас. Оператори 5, 6 призначено для організації еволюційного процесу з використанням однорідного групування за часом. Крок за часом обрано рівним одній добі. Якщо поточне значення часу перевищує заданий період планування, то блок 12 розраховує сумарні витрати системи L_j за дане j -е випробування ($j = 1, 2, \dots, N$).

Одержані значення L_j потім обробляють у блоці 23. Обробка передбачає розрахунок середнього арифметичного значення $\bar{L} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N L_j$, яке є

оцінкою математичного сподівання витрат, а також вибіркової дисперсії

$$\sigma_L^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (L_j - \bar{L})^2,$$

за допомогою якої визначають довірчий інтервал оцінки L та потрібну кількість повторень N . Оператор 7 перевіряє надходження замовленої раніше поставки у поточний момент часу. Якщо поставку здійснено, то оператор 8 збільшує поточний рівень запасу на величину поставки q . Генерування попиту x і затримки λ здійснюють, відповідно, оператори 9 та 16 за методом Монте-Карло з використанням заданих законів розподілу $F(x)$ та $F(\lambda)$. Оператор 10 віднімає від поточного запасу обсяг здійсненої поставки.

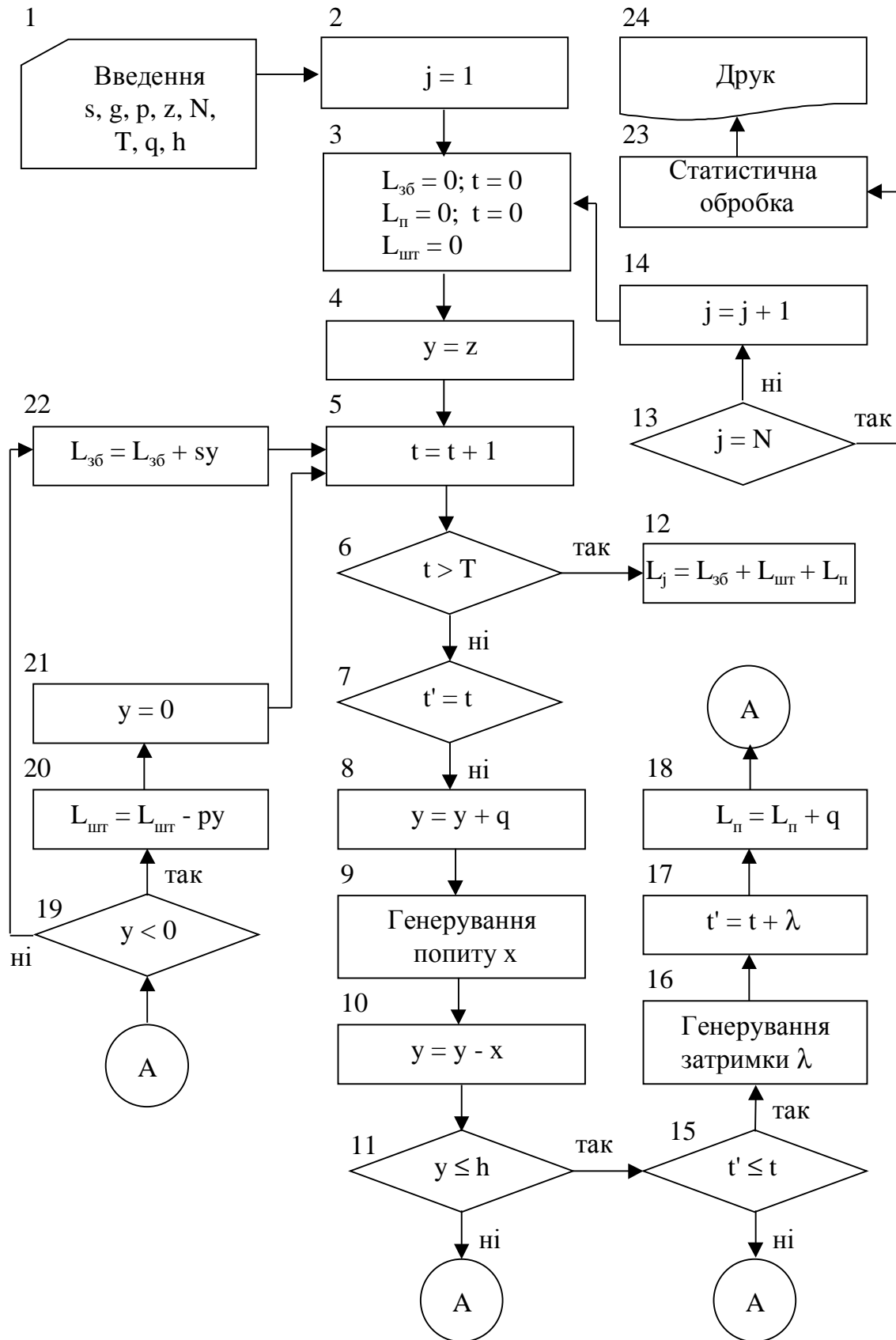


Рис. 3.4. Логічна структурна схема імітаційної моделі управління запасами

Оператор 19 перевіряє, чи був попит задоволений. Якщо так, то оператор 22 визначає вартість зберігання запасу, що залишився. У протилежному разі оператор 20 обчислює величину штрафу, а оператор 21 прирівнює поточний запас до нуля.

Оператори 11 та 15 імітують організацію замовлення на постачання продукту, яке здійснюється, якщо поточне значення запасу досягає критичного рівня h , і при цьому термін виконання попереднього замовлення не перевищує поточного моменту часу моделі (тобто немає невиконаних замовлень). Якщо замовлення на постачання продукту видається, то оператор 17 формує термін виконання замовлення, а оператор 18 обчислює відповідні витрати.

4. РЕГРЕСІЙНІ МОДЕЛІ

Завданням дослідження складних систем і процесів часто є перевірка наявності й встановлення типу зв'язку між незалежними змінними x_i (предикторами, факторами), значення яких можуть змінюватися дослідником і мають деяку заздалегідь задану похибку, та залежною змінною (відгуком) z . Розв'язування таких задач є предметом регресійного аналізу.

4.1. Загальна характеристика методів та задач регресійного аналізу

Класичний регресійний аналіз включає методи побудови математичних моделей досліджуваних систем, методи визначення параметрів цих моделей і перевірки їх адекватності. Він передбачає, що регресія є лінійною комбінацією лінійно незалежних базисних функцій від факторів з невідомими коефіцієнтами (параметрами). Фактори й параметри є детермінованими. Відгуки є рівноточними (тобто мають однакові дисперсії) некорельованими випадковими величинами. Вважається також, що всі змінні вимірюються у неперервних числових шкалах.

Звичайна процедура класичного регресійного аналізу є такою. Спочатку обирають гіпотетичну модель, тобто формулюють гіпотези про фактори, які суттєво впливають на досліджувану характеристику системи, і тип залежності відгуку від факторів. Потім за наявними емпіричними даними щодо залежності відгуку від факторів оцінюють параметри обраної моделі. Далі за статистичними критеріями перевіряють її адекватність.

При побудові регресійних моделей реальних систем і процесів вказані вище постулати виконуються не завжди. У більшості випадків їх невиконання призводить до некоректності використання процедур класичного регресійного аналізу та потребує застосування більш складних методів аналізу емпіричних даних.

Постулат про рівноточність і некорельованість відгуків не є обов'язковим. У разі його невиконання процедура побудови регресійної моделі певною мірою змінюється, але суттєво не ускладнюється.

Більш складною проблемою є обрання моделі та її незалежних змінних. У класичному регресійному аналізі припускають, що набір факторів задається однозначно, всі суттєві змінні присутні в моделі й немає ніяких альтернативних способів обрання факторів. У практиці це припущення не виконується. Тому виникає необхідність розробки формальних і неформальних процедур перетворення та порівняння моделей. Для пошуку оптимальних формальних перетворень використовують методи факторного та дискримінантного аналізу. З розвитком сучасної обчислювальної техніки було розроблено методи послідовної побудови регресійних моделей.

У класичній регресії фактори вважають детермінованими, тобто припускається, що дослідник має про них всю необхідну інформацію з абсолютною точністю. У практиці це припущення не виконується. Відмова від детермінованості незалежних змінних веде до побудови моделей кореляційного аналізу. На жаль, сьогодні їх практичне використання обмежено випадком однофакторних моделей (парною кореляцією). Це пов'язано зі складностями забезпечення та перевірки вимог до багатовимірних функцій розподілу. У деяких випадках можуть використовуватися компромісні методи конфлюентного аналізу, які припускають можливість нормально розподіленого та усіченого розкиду значень факторів. Якщо ця умова виконується, побудову моделі можна звести до багаторазового розв'язування регресійної задачі.

Відмова від припущення про детермінованість параметрів моделей у регресійному аналізі призводить до суттєвих ускладнень, оскільки порушує його статистичні основи. Але у практиці це припущення виконується не завжди. У деяких випадках можливо вважати параметри випадковими величинами із заданим законом розподілу. Тоді як оцінки параметрів можна обрати їх умовні математичні сподівання для відгуків, що спостерігалися. Умовні розподіли та сподівання розраховують за узагальненою формулою Байєса. Тому відповідні методи називають байєсовським регресійним аналізом.

Регресійні моделі часто використовують для опису процесів, що розвиваються в часі. У деяких випадках це призводить до необхідності переходу від випадкових величин відгуків до випадкових послідовностей, випадкових процесів або випадкових полів. Однією з поширених і найпростіших моделей такого типу є модель авторегресії. Вона передбачає, що відгук залежить не тільки від факторів, але також і від часу. Якщо останню залежність можна виявити, то задача зводиться до стандартної задачі побудови регресії для модифікованого відгуку. В інших випадках необхідно використовувати більш складні прийоми.

Процедури класичного регресійного аналізу передбачають, що закон розподілу відгуків є нормальним. Проте у практиці найчастішими є випадки, коли цей закон невідомий чи відомо, що він не є нормальним. Їх дослідження зумовило виникнення непараметричного регресійного аналізу, який не передбачає необхідності попереднього задання функції розподілу.

Важливою проблемою, яка виникає при оцінюванні параметрів регресійних моделей, є наявність грубих помилок у наборі аналізованих даних. Такі помилки можуть виникати внаслідок неправильних дій дослідника, збоїв у роботі апаратури, неконтрольованих короткотривалих сильних зовнішніх впливів на досліджувану систему тощо. Використовують два підходи, що дають змогу зменшити вплив грубих помилок на результати аналізу. У першому з них розробляють критерії й алгоритми пошуку

помилкових даних. Потім такі дані відкидають. У другому підході розробляють такі алгоритми аналізу, які є нечутливими до наявних помилкових даних (алгоритми робастного оцінювання параметрів). У таких алгоритмах, як критерій оптимальності, часто використовують мінімум суми модулів похибок, або мінімум максимального модуля похибки.

Одним з основних постулатів класичного регресійного аналізу є припущення, що найкращі оцінки параметрів можна одержати, використовуючи метод найменших квадратів. У практиці оцінки, одержані за допомогою цього методу, часто бувають недостатньо точними і містять великі похибки. Причиною цього може бути структура регресійної моделі. Якщо вона становить собою лінійну комбінацію експонент або є поліномом високого степеня, то це призводить до поганої зумовленості матриці системи нормальних рівнянь і нестійкості оцінок параметрів. Підвищення стійкості оцінок можна досягти шляхом відмови від вимоги їх незміщеності. Розвиток цього напрямку досліджень спричинив виникнення гребіневого або рідж-регресійного аналізу.

Характерною рисою регресійних моделей, що відрізняє їх від математичних моделей інших типів, є те, що вони не відображають структури досліджуваних систем і процесів та присутні в них зв'язки. При побудові регресійних моделей ставиться завдання пошуку статистичних зв'язків між окремими характеристиками системи або між її вхідними та вихідними параметрами. Слід зазначити, що класифікація математичних методів дослідження складних систем перебуває в стані розвитку, і на сьогодні існують різні підходи до поняття "математичне моделювання". Деякі автори включають до нього лише побудову моделей, які відображають причинні зв'язки та структуру об'єкта дослідження. При більш широкому підході до математичних зараховують також регресійні, імітаційні та деякі інші типи моделей, які є множинами символічних математичних об'єктів і співвідношень між ними та можуть досліджуватися сучасними математичними методами.

Найчастіше задача побудови регресійної моделі формулюється так. Необхідно знайти функцію заданого класу, для якої функціонал

$$F(\alpha) = \sum_{i=1}^n (z_i(\alpha, \mathbf{X}) - y_i)^2 \rightarrow \min. \quad (4.1)$$

У цьому виразі $z_i(\alpha, \mathbf{X})$ – значення функції, що апроксимує залежність у i -й точці, y_i – відповідне значення емпіричної залежності, α – вектор параметрів, які треба знайти, \mathbf{X} – вектор незалежних змінних. Одержану функцію $z(\alpha, \mathbf{X})$ називають регресійною моделлю. Метод її пошуку,

оснований на використанні критерію (4.1), називають методом найменших квадратів.

Функцію, що апроксимує, у разі однієї незалежної змінної часто шукають у вигляді полінома $z(x) = \sum_{j=0}^M \alpha_j x^j$, оберненого полінома

$z(x) = \frac{1}{\sum_{j=0}^M \alpha_j x^j}$, експоненціальних або показникових функцій $z = \alpha e^x$ чи

$z = \alpha b^x$, ступеневої функції $z = \alpha x^b$, лінійно-логіарифмічної функції $z = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 \ln x$, тригонометричного ряду Фур'є тощо. У разі декількох незалежних змінних найчастіше використовують моделі лінійні як за

параметрами, так і за незалежними змінними $z = \alpha_0 + \sum_{i=1}^p \alpha_i x_i$, а також полі-

номіальні моделі, що лінійні за параметрами, але нелінійні за незалежними змінними $z = \alpha_0 + \sum_{i=1}^p \alpha_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \geq j}}^p \alpha_{ij} x_i x_j + \sum_{\substack{i,j,k=1 \\ i \geq j \\ j \geq k}}^p \alpha_{ijk} x_i x_j x_k + \dots$. Останні відпо-

відають розкладенню функції відгуку в ряд Тейлора. Проте можливе й використання для апроксимації інших видів залежностей.

Регресійні моделі називають лінійними або нелінійними, якщо вони є лінійними або нелінійними за параметрами. При цьому визначення "лінійна" часто опускають. Значення найвищого степеня предиктора в поліноміальних моделях називають порядком моделі. Наприклад,

$$z = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \alpha_3 x^3 + \varepsilon, \quad (4.2)$$

де ε – похибка моделі, є лінійною моделлю третього порядку.

Обрання функції, що апроксимує, є нетривіальною задачею. Спочатку рекомендують нанести наявні емпіричні дані на графік. Це дає змогу визначити наявність чи відсутність залежності між досліджуваними величинами, а також зробити деякі припущення про можливий тип такої залежності. На рис. 4.1 як приклади подано результати, одержані деякими кандидатами на виборах Президента України у 1999 році³. З наведених даних видно, що у першому разі кореляція практично відсутня, а у другому можна говорити про наявність від'ємної кореляції.

Після того, як було встановлено наявність кореляції між досліджуваними величинами, виникає необхідність підбору функції, що апроксимує одержану залежність.

³ За даними Центральної виборчої комісії України.

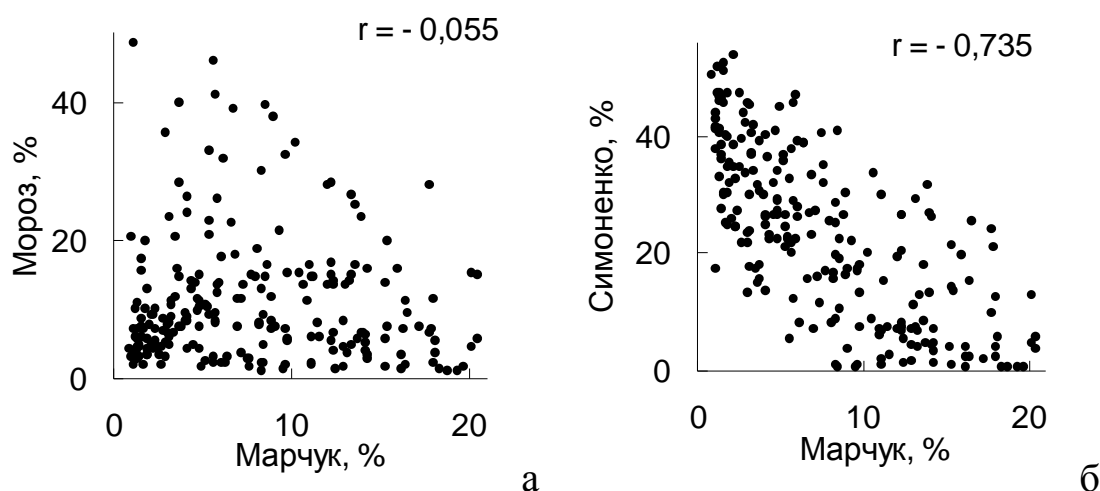


Рис. 4.1. Кореляція між рівнями підтримки окремих кандидатів у I турі виборів Президента України у 1999 році (r – коефіцієнт кореляції)

Важливою особливістю регресійних моделей є те, що їх не можна використовувати за межами тієї області значень вихідних параметрів, для якої була побудована ця модель. При побудові регресійних моделей типу полінома, оберненого полінома, тригонометричного ряду та деяких інших слід мати на увазі, що, збільшуючи кількість членів ряду, можна одержати скільки завгодно близьке до нуля значення функціонала (4.1). Проте це не завжди свідчить про якість апроксимації, оскільки цей функціонал не дає інформації про ступінь близькості апроксимуючої функції та емпіричної залежності у проміжках між наявними точками. Найпростішим критерієм, що дозволяє обмежити кількість членів ряду, який апроксимує емпіричну залежність, є порівняння відношення значення функціонала (4.1) до суми квадратів погрешностей емпіричних значень функції, а також величини, оберненої до цього відношення, із значенням критерію Фішера для відповідного числа степенів вільності. Якщо перше відношення перевищує значення критерію Фішера, то це свідчить про недостатню кількість членів ряду. Якщо значення критерію Фішера є меншим за друге відношення, можна зробити висновок про надмірно велику кількість членів ряду. Іншою проблемою може бути наявність декількох екстремумів функціонала (4.1). У цьому разі необхідно мати на увазі, що більшість стандартних алгоритмів дозволяють знаходити локальні, а не глобальні екстремуми функціоналів. Тому результат аналізу залежить від вибору початкових умов пошуку.

Регресійні моделі, побудовані на базі поліномів, як правило, є формальними. Їх використовують для опису систем і процесів, теорію яких розроблено недостатньо. Більш цікавими для дослідників зазвичай є змістовні моделі, що відображають структуру та зв'язки в системах, сутність та механізми процесів. Якщо теоретичні основи досліджуваних систем і

процесів достатньо розроблені, експериментальні дані потрібні для визначення окремих параметрів моделі.

Як правило, змістовні моделі бувають нелінійними за параметрами. Методологію їх дослідження розробляє нелінійний регресійний аналіз. Для задач, що розв'язуються в межах цього напрямку, характерними є також й інші ускладнення. Зокрема, моделі зазвичай бувають багатовимірними. При цьому окремі відгуки можуть бути зв'язані один з одним. Сама регресійна модель часто задається у неявному вигляді і є неаналітичним розв'язком системи алгебраїчних або диференціальних рівнянь. Нестійкість оцінок параметрів у нелінійних моделях різко зростає. Як правило, такі задачі мають кілька розв'язків або не мають розв'язків взагалі.

Аналогічні ускладнення можуть виникнути при побудові функціональних моделей, коефіцієнти яких необхідно визначати шляхом апроксимації емпіричних даних. Але в цьому разі потрібно застосовувати інші критерії адекватності моделі. Важливою умовою адекватності моделі є відповідність загальної поведінки моделі, що апроксимує, реальній поведінці об'єкта дослідження у подібних умовах. Крім того, необхідно, щоб за малих змін вихідних даних параметри моделі, що підбираються при апроксимації, змінювалися мало або залишалися незмінними. Ще однією складністю, що виникає при аналізі таких моделей, є можливість одержання значень параметрів, які є неприпустимими з точки зору змістовної постановки задачі. Наприклад, може бути одержано від'ємні значення параметрів, що мають лише невід'ємні значення. Тому задачу пошуку екстремуму функціонала (4.1) у цьому разі треба ставити як задачу умовної оптимізації, а не безумовної, як при побудові регресійних моделей.

4.2. Лінійні моделі

Найпростішим для аналізу та найбільш дослідженим є випадок лінійної кореляційної залежності між досліджуваними величинами X та Y . Наявність такої кореляції можна перевірити, розрахувавши коефіцієнт кореляції

$$r = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i - \bar{X} \bar{Y}}{\sigma_X \sigma_Y}, \quad (4.3)$$

де n – кількість пар відповідних значень (x_i, y_i) , \bar{X}, \bar{Y} – середні арифметичні величин X та Y , σ_X та σ_Y – їх середньоквадратичні відхилення. Коефіцієнт кореляції може змінюватися у межах від -1 до $+1$. Близькі до $+1$ значення свідчать про наявність прямої лінійної залежності, а близькі до -1 – про обернену лінійну залежність. Якщо коефіцієнт кореляції є близьким

до нуля, то лінійна кореляція між досліджуваними величинами відсутня, але можлива нелінійна кореляція між ними.

Розглянемо детальніше задачу підбору параметрів відомої залежності $z = f(x)$ за набором наявних емпіричних даних (x_i, y_i) . Ця задача найпростіше розв'язується для лінійної моделі

$$z(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \varepsilon. \quad (4.4)$$

Вважають, що найкращими значеннями параметрів α_0 і α_1 будуть ті, для яких сума квадратів відхилень емпіричних значень y_i від розрахункових значень $z(x_i)$ має мінімальне можливе значення. Для знаходження таких значень треба розв'язати систему:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \alpha_0} \sum_{i=1}^n [z(x_i) - y_i]^2 = \frac{\partial}{\partial \alpha_0} \sum_{i=1}^n [\alpha_1 x_i + \alpha_0 - y_i]^2 = 0, \\ \frac{\partial}{\partial \alpha_1} \sum_{i=1}^n [z(x_i) - y_i]^2 = \frac{\partial}{\partial \alpha_1} \sum_{i=1}^n [\alpha_1 x_i + \alpha_0 - y_i]^2 = 0. \end{cases} \quad (4.5)$$

З (4.5) можна одержати такі вирази для оцінок α_0^* і α_1^* коефіцієнтів лінійної залежності:

$$\alpha_1^* = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}; \quad (4.6)$$

$$\alpha_0^* = \bar{Y} - \alpha_1^* \bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i - \alpha_1^* \sum_{i=1}^n x_i}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2}.$$

Можна показати, що перше рівняння в (4.6) є відношенням коваріації $\text{cov}(x, y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y})$ до дисперсії $\sigma_x^2 = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2$, тобто

$$\alpha_1^* = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2}. \quad (4.7)$$

У багатьох випадках завдяки особливостям округлення чисел у ЕОМ останній вираз дає змогу одержати більш точні оцінки параметрів.

Як приклад розглянемо таку задачу. У таблиці 4.1 подано емпіричні дані, для яких треба побудувати регресійну модель, а також дані, необхідні для розрахунку її параметрів.

Таблиця 4.1

№ випробування	x_i	y_i	x_i^2	$x_i \cdot y_i$	z	залишок
1	0	0,310	0	0	0,516	0,206
2	0,3	1,037	0,09	0,311	1,506	0,470
3	0,6	2,513	0,36	1,508	2,497	-0,017
4	0,9	3,843	0,81	3,459	3,487	-0,356
5	1,2	4,840	1,44	5,807	4,477	-0,363
6	1,5	6,020	2,25	9,030	5,467	-0,553
7	1,8	5,865	3,24	10,557	6,457	0,592
8	2,1	7,470	4,41	15,686	7,447	-0,022
9	2,4	8,889	5,76	21,332	8,438	-0,451
10	2,7	9,25399	7,29	24,98577	9,427681	0,174
11	3	10,39294	9	31,17882	10,41785	0,025
12	3,3	11,11287	10,89	36,67247	11,40801	0,295
Σ	19,8	71,54526	45,54	160,5277		0
α_1^*	3,300548	α_0^*	0,516201			

На рис. 4.2 наведено емпіричні точки та графік залежності, побудований за одержаною методом найменших квадратів моделлю.

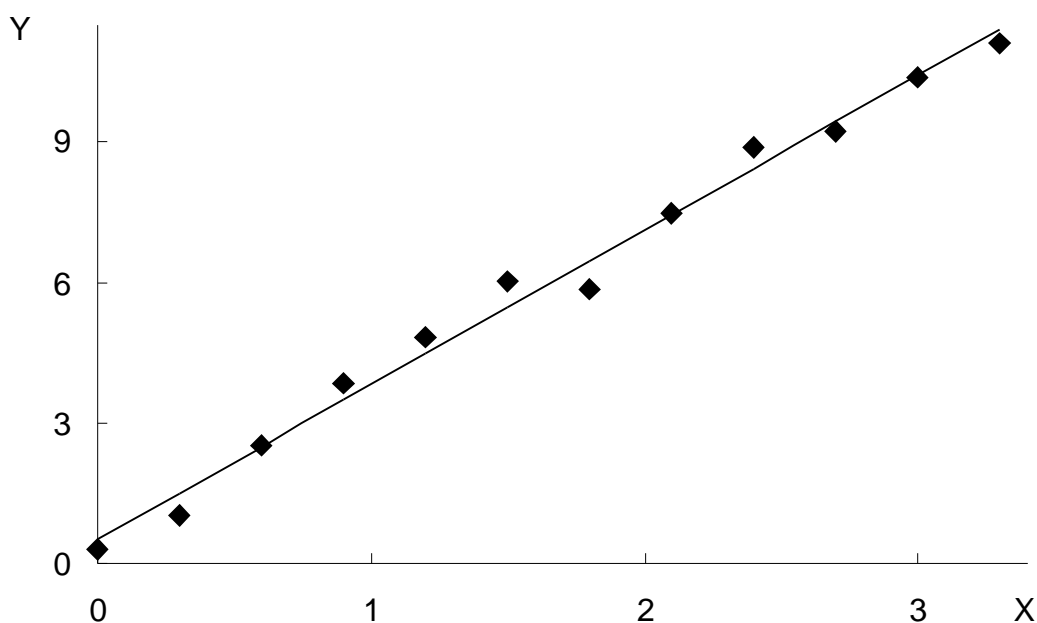


Рис. 4.2

Як видно з рисунка, одержана модель задовільно описує наявні емпіричні дані.

Для розглянутої регресійної моделі сума залишків $\sum_{i=1}^n (y_i - z(x_i))$ дорівнює нулеві, якщо модель містить вільний член α_0 . Виключення вільного члена з моделі зазвичай є невиправданим. Задання моделі з $\alpha_0 = 0$ доцільно лише у випадках, коли з теорії відомо, що для нульових значень предикторів відгук має бути рівним нулеві. Якщо це невідомо, але бажано одержати модель, що не містить вільного члена, більш доцільним є центрування даних.

Підставляючи до моделі $z(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \varepsilon$ оцінку коефіцієнта α_0^* з (4.6), можна одержати:

$$Y^* = \alpha_0^* + \alpha_1^* x + \varepsilon = \bar{Y} + \alpha_1^* (x - \bar{X}) + \varepsilon. \quad (4.8)$$

Звідси отримуємо центровану модель

$$Y - \bar{Y} = \alpha_1^* (x - \bar{X}) + \varepsilon, \quad (4.9)$$

яка не містить вільного члена.

Незважаючи на те, що, як правило, реальні залежності відгуків від факторів є нелінійними, розглянутий випадок широко використовується у практиці побудови регресійних моделей. Це пов'язано з трьома основними причинами. По-перше, він є найбільш дослідженим. Зокрема, для нього достатньо повно розроблені процедури визначення статистичних характеристик одержуваних оцінок параметрів, перевірки адекватності моделей тощо. По-друге, у багатьох випадках складні залежності можна представити як набір лінійних (на малих відрізках змінювання факторів) залежностей. По-третє, нелінійні залежності часто можна перетворити до лінійного вигляду шляхом заміни змінних. Приклади такого перетворення наведено в таблиці 4.2.

Перетворення нелінійних залежностей до лінійних є припустимими, коли вихідні дані є точними. У практиці вони завжди вимірюються з деякою похибкою. Розглянемо модель

$$z = \alpha_0 x^{\alpha_1} + \varepsilon, \quad (4.10)$$

де ε – похибка вимірювань.

Приклади лінеаризації нелінійних залежностей

Вихідна залежність	Лінеаризована залежність	Нові змінні
$z = \alpha_0 \exp(-\alpha_1 x)$	$\ln z = \ln \alpha_0 - \alpha_1 x$	$x, \ln z$
$z = \alpha_0 [1 - \exp(-\alpha_1 x)]$	$\ln \frac{\alpha_0}{\alpha_0 - z} = \alpha_1 x$	$x, \ln \frac{\alpha_0}{\alpha_0 - z}$
$z = \alpha_0 \exp(-\alpha_1/x)$	$\ln z = \ln \alpha_0 - \alpha_1/x$	$1/x, \ln z$
$z = \alpha_0 x^{\alpha_1}$	$\ln z = \ln \alpha_0 + \alpha_1 \ln x$	$\ln x, \ln z$
$z = \alpha_0 x + \alpha_1 x^2$	$z/x = \alpha_0 + \alpha_1 x$	$x, z/x$
$z = \alpha_0 \sin(\alpha_1 x)$	$\arcsin(z/\alpha_0) = \alpha_1 x$	$x, \arcsin(z/\alpha_0)$

Її лінеаризована форма матиме вигляд:

$$\ln z = \ln \alpha_0 + \alpha_1 \ln x + \varepsilon', \quad (4.11)$$

де ε' є невідомою випадковою величиною. Тому використання як лінеаризованої форми виразу

$$\ln z = \ln \alpha_0 + \alpha_1 \ln x \quad (4.12)$$

буде коректним лише у випадку, коли величина ε' є малою порівняно з іншими доданками правої частини (4.11).

Розглянемо більш докладно задачу оцінювання параметрів лінійної моделі при відомому зв'язку $Y = z(X)$, де X, Y – випадкові величини, а $p(x, y)$ – їх сумісна щільність імовірності. Як критерій оптимальності підбору параметрів моделі візьмемо мінімум середнього значення квадрата відхилення $z(x)$ від наявних емпіричних точок (x_i, y_i) :

$$M\left\{\bar{Y} - z(x)\right\}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [y - z(x)]^2 p(x, y) dx dy, \quad (4.13)$$

де n – кількість емпіричних точок. Він відповідає мінімуму математичного сподівання середнього квадрата відхилення і є умовним математичним сподіванням величини Y при заданому x , тобто

$$z(x) = M\{Y | x\}. \quad (4.14)$$

Рівняння (4.14) є кривою регресії.

У випадку $z(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$ значення параметрів α_0, α_1 можна знайти так. Умовою мінімуму $M\left\{ \left[\bar{Y} - z(x) \right]^2 \right\}$ є:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \alpha_0} M\left\{ \left[Y - (\alpha_0 + \alpha_1 x) \right]^2 \right\} = 0; \\ \frac{\partial}{\partial \alpha_1} M\left\{ \left[Y - (\alpha_0 + \alpha_1 x) \right]^2 \right\} = 0. \end{cases} \quad (4.15)$$

З першого рівняння цієї системи маємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha_0} M\left\{ \left[Y - (\alpha_0 + \alpha_1 x) \right]^2 \right\} &= \frac{\partial}{\partial \alpha_0} M\left\{ Y^2 - 2Y(\alpha_0 + \alpha_1 x) + \alpha_0^2 + 2\alpha_0\alpha_1 x + \alpha_1^2 x^2 \right\} = \\ &= -2M\{Y\} + 2\alpha_0 + 2\alpha_1 M\{x\} = 0; \end{aligned} \quad (4.16)$$

Звідси

$$M\{Y\} = \alpha_0 + \alpha_1 M\{x\}. \quad (4.17)$$

З іншого рівняння системи з урахуванням (4.17) маємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha_1} M\left\{ \left[Y - (\alpha_0 + \alpha_1 x) \right]^2 \right\} &= \frac{\partial}{\partial \alpha_1} M\left\{ \left[Y - (M\{Y\} - \alpha_1 M\{x\} - \alpha_1 x) \right]^2 \right\} = \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha_1} M\left\{ \left[(Y - M\{Y\}) - \alpha_1 (x - M\{x\}) \right]^2 \right\} = \\ &= \frac{\partial}{\partial \alpha_1} M\left\{ (Y - M\{Y\})^2 - 2\alpha_1 (Y - M\{Y\})(x - M\{x\}) + \alpha_1^2 (x - M\{x\})^2 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Звідси:

$$\begin{cases} M\left\{ (Y - M\{Y\})(x - M\{x\}) \right\} = \alpha_1 M\left\{ (x - M\{x\})^2 \right\}; \\ \alpha_1 = \frac{M\left\{ (Y - M\{Y\})(x - M\{x\}) \right\}}{M\left\{ (x - M\{x\})^2 \right\}} = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x^2}. \end{cases} \quad (4.19)$$

Таким чином, параметри моделі є функціями коваріації $\text{cov}(x, y)$ та дисперсії σ_x^2 величин X та Y .

У випадку, коли сумісна функція щільності ймовірності є невідомою, або коли величини X та Y незалежні, емпіричну модель лінійної регресії зручно записувати у вигляді

$$z = \alpha_0 + \alpha_1(x - \bar{x}) + \varepsilon. \quad (4.20)$$

Для кожної заданої точки x_i математичне сподівання величини Y_i дорівнюватиме

$$\bar{Y}_i = \alpha_0 + \alpha_1(x_i - \bar{x}) + \varepsilon_i. \quad (4.21)$$

Припустимо, що залишок ε_i є нормально розподіленою випадковою величиною із середнім, що дорівнює нулю, а залишки ε_i та ε_j є некорельованими при $i \neq j$, тобто $\text{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0$. Якщо ε є сумою різних незалежних одна від одної похибок, то, згідно із центральною граничною теоремою, вона буде наближатися до нормального розподілу зі зростанням кількості доданків. Припущення, що будь-яка випадкова величина складається з великої кількості інших випадкових величин, є цілком розумним. Але припущення про незалежність цих величин одна від одної виконується не завжди. Тому його треба перевіряти в кожному окремому випадку.

Параметри α_0, α_1 можна оцінити за формулами (4.6). Розглянемо питання про точність оцінок. Для цього запишемо таку тотожність:

$$(y_i - \bar{Y}) = (y_i^* - \bar{Y}) + (y_i - y_i^*). \quad (4.22)$$

Тут y_i^* є оцінкою значення величини y при $x = x_i$. Якщо піднести обидві частини цієї тотожності до квадрата та взяти суму від $i = 1$ до n , то одержимо:

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i^* - \bar{Y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - y_i^*)^2. \quad (4.23)$$

У цієї рівності немає члена $2 \sum_{i=1}^n (y_i^* - \bar{Y})(y_i - y_i^*)$, оскільки:

$$\begin{aligned} y_i - \bar{Y} &= \alpha_1(x_i - \bar{X}); \\ y_i - y_i^* &= y_i - \bar{Y} - \alpha_1(x_i - \bar{X}); \\ \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{Y})(y_i - y_i^*) &= \alpha_1 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})(y_i - \bar{Y}) - \alpha_1^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2 = 0, \end{aligned}$$

враховуючи (4.7) і (4.19).

Розглянемо склад виразу (4.23). Його ліва частина є сумою квадратів відхилень значень, що спостерігалися, відносно загального середнього. Перший доданок правої частини є сумою квадратів відхилень оцінок цих значень, зроблених на основі обраної моделі регресії, від загального середнього. Її часто називають сумою квадратів відносно регресії. Другий доданок правої частини є сумою квадратів відхилень значень, що спостерігалися, від їх оцінок, одержаних з використанням обраної моделі. Цей доданок називають сумою квадратів, що зумовлена регресією. Для того, щоб модель була придатною для завбачення значень досліджуваної величини, необхідно, щоб він був малим порівняно із сумою квадратів відносно регресії. У граничному випадку він має дорівнювати нулю.

Будемо вважати дисперсію залишку $\sigma_{\varepsilon_i}^2$ і, відповідно, дисперсію відгуку $\sigma_{Y_i}^2$ сталими. Дисперсія емпіричних точок відносно середнього $\sigma_{Y_i}^2$ буде рівною їх дисперсії σ_{YX}^2 відносно лінії регресії, коли постульована модель є істинною. У протилежному випадку $\sigma_{Y_i}^2 > \sigma_{YX}^2$. Оцінкою величини σ_{YX}^2 є відношення суми квадратів відхилень спостережень від середнього до числа степенів вільності. Останнє беруть рівним різниці між числом випробувань і кількістю констант, знайдених незалежно одна від одної за їх результатами. У випадку, що розглядається, воно дорівнює $n-2$, оскільки з емпіричних даних визначають два параметри прямої регресії. Тобто

$$\sigma_{XY}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{n-2}. \quad (4.24)$$

Для прикладу, наведеного в таблиці 4.1, можна одержати $\sigma_{YX}^2 = 14,02$, $\sigma_{Y_i}^2 = 14,17$, $\sigma_{\varepsilon_i}^2 = 0,15$. Таким чином, рівність $\sigma_{Y_i}^2 = \sigma_{YX}^2 + \sigma_{\varepsilon_i}^2$, яка випливає з (4.23), є виконаною.

Нехай p_i є числом повторних вимірювань величини \bar{Y}_i при заданому значенні x_i . Тоді квадратична форма, що мінімізується в методі найменших квадратів,

$$Q = \sum_{i=1}^n (\bar{Y}_i - z(x_i))^2 p_i = \sum_{i=1}^n p_i \left[\bar{Y}_i - \alpha_0 - \alpha_1 (x_i - \bar{x}) \right]^2. \quad (4.25)$$

Мінімізуючи її за параметрами α_0, α_1 , як у попередньому випадку, одержуємо оцінки параметрів

$$\begin{cases} \alpha_0^* = \sum_{i=1}^n p_i \bar{Y}_i / \sum_{i=1}^n p_i = \bar{Y}; \\ \alpha_1^* = \sum_{i=1}^n p_i \bar{Y}_i (x_i - \bar{x}) / \sum_{i=1}^n p_i (x_i - \bar{x})^2. \end{cases} \quad (4.26)$$

У припущенні, що умовний розподіл величини \bar{Y}_i при заданому x_i є нормальним, оцінкою дисперсії буде величина

$$\sigma_{Y_i}^{2*} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_i (\bar{Y}_i - Y_i^*)^2, \quad (4.27)$$

де $Y_i^* = \alpha_0^* + \alpha_1^* (x_i - \bar{x})$.

Слід відмітити, що висновки, одержувані на основі мінімізації дисперсії похибки, є правильними тільки тоді коли постульована модель коректна. В інших випадках вони можуть виявитися помилковими. Перед прийняттям рішення стосовно моделі треба перевірити гіпотезу, що лінійна модель $z = \alpha_0 + \alpha_1(x - \bar{x})$ задовільно описує експериментальні дані із заданою точністю $1 - \eta$. Для цього визначають міру експериментальної похибки

$$S_a^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n p_i (\bar{Y}_i - Y_i^*)^2. \quad (4.28)$$

Ця величина є зміщеною оцінкою дисперсії $\sigma_{Y_i}^2$. Незміщеною оцінкою цієї дисперсії є величина

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n p_i - n}, \quad (4.29)$$

де Y_{ij} – j -е одиничне вимірювання при $x = x_i$. Критерієм адекватності моделі при заданій надійності $1 - \eta$ є виконання нерівності

$$S_a^2 / S_e^2 \leq F_{1-\eta}, \quad (4.30)$$

де $F_{1-\eta}$ – це відповідне значення функції розподілу Фішера, для чисел степенів вільності $n_1 = n_2 = n - 1$.

Довірчі інтервали для параметрів α_0, α_1 можна знайти за допомогою коефіцієнтів t-розподілу Стьюдента з числом степенів вільності $\sum_{i=1}^n p_i - 2$:

$$\begin{cases} \alpha^* - t_{1-\eta/2} S_{\alpha^*} \leq \alpha \leq \alpha^* + t_{1-\eta/2} S_{\alpha^*} ; \\ S_{\alpha^*} = \sqrt{\frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n p_i (\bar{\alpha} - \alpha^*)^2} . \end{cases} \quad (4.31)$$

4.3. Поліноміальні моделі

У багатьох випадках емпіричні залежності можна описати поліноміальними моделями вигляду

$$z = \sum_{i=1}^q \alpha_i x^i . \quad (4.32)$$

Оцінки параметрів таких моделей можна одержати шляхом розв'язування нормальних рівнянь вигляду

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \dots & \sum x_i^q \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \dots & \sum x_i^{q+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum x_i^q & \sum x_i^{q+1} & \sum x_i^{q+2} & \dots & \sum x_i^{2q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum Y_i \\ \sum Y_i x_i \\ \dots \\ \sum Y_i x_i^q \end{pmatrix} . \quad (4.33)$$

Зазвичай стовпці, що утворюють матрицю X , не ортогональні. Це призводить до того, що за необхідності збільшення степеня полінома буває необхідним перераховувати оцінки всіх його коефіцієнтів. Тому для поліномів високих степенів більш раціональним є заміна вихідного рівняння (4.32) іншим:

$$z = \sum_{i=1}^q \alpha_i' \zeta_i , \quad (4.34)$$

де $\zeta_i = \zeta_i(x)$ є поліномами i -го степеня за x , які задовольняють умовам ортогональності:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n \zeta_{ij} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, q; \\ \sum_{j=1}^n \zeta_{ij} \zeta_{i'j} = 0, \quad i \neq i', \end{cases} \quad (4.35)$$

де ζ_{ij} є i -им поліномом для точки x_j .

Квадратична форма для мінімізації за методом найменших квадратів має вигляд

$$Q = \sum_{j=1}^n (Y_j - \alpha'_0 - \alpha'_1 \zeta_{1j} - \dots - \alpha'_q \zeta_{qj})^2. \quad (4.36)$$

Значення, що відповідають мінімуму, можна знайти, розв'язавши систему:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial \alpha'_0} = -2 \sum_{j=1}^n (Y_j - \alpha'^*_0 - \alpha'^*_1 \zeta_{1j} - \dots - \alpha'^*_q \zeta_{qj}) = 0; \\ \frac{\partial Q}{\partial \alpha'_i} = -2 \left(\sum_{j=1}^n Y_j \zeta_{ij} - \alpha'^*_0 \sum_{j=1}^n \zeta_{ij} - \alpha'^*_1 \sum_{j=1}^n \zeta_{1j} \zeta_{ij} - \dots - \alpha'^*_i \sum_{j=1}^n \zeta_{ij}^2 - \dots - \right. \\ \left. - \alpha'^*_q \sum_{j=1}^n \zeta_{qj} \zeta_{ij} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, q. \end{cases} \quad (4.37)$$

Звідси, використовуючи умови ортогональності (4.35), одержуємо:

$$\alpha'^*_0 = \bar{Y}; \quad \alpha'^*_i = \frac{\sum_{j=1}^n Y_j \zeta_{ij}}{\sum_{j=1}^n \zeta_{ij}^2}. \quad (4.38)$$

Використовуючи умови ортогональності, можна одержати явний вигляд поліномів для випадку, коли значення x змінюються з рівним кроком ω :

$$\begin{cases} \zeta_{0j} = 1; \\ \zeta_{1j} = v_j - \bar{v}_j; \\ \zeta_{2j} = \zeta_{1j}^2 - (n^2 - 1)/12, \end{cases} \quad (4.39)$$

де $v_j = (x_{j+1} - x_1) / \omega$.

Поліноми вищих степенів одержують з рекурентної формули

$$\zeta_{r+1,j} = \zeta_{1j}\zeta_{rj} - \frac{r^2(n^2 - r^2)}{4(4r^2 - 1)}\zeta_{r-1,j}. \quad (4.40)$$

Розглянемо такий приклад. У таблиці 4.3 наведено результати вимірювання деякої величини.

Таблиця 4.3

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_j	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
Y_j	23	29	41	60	79	88	83	61	33	27
v_j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Y_i^*	24,09	30,1	42,23	60,96	79,8	89,74	83,86	61,81	34,38	28,03

Побудуємо модель досліджуваної залежності у вигляді полінома 5-го степеня $z = \alpha'_0 + \alpha'_1 \zeta_1 + \alpha'_2 \zeta_2 + \alpha'_3 \zeta_3 + \alpha'_4 \zeta_4 + \alpha'_5 \zeta_5$, де $\zeta_i = \sum_{t=1}^i \beta_{it} x^t$ – поліноми i -го степеня, які задовольняють умовам ортогональності. Дані, що необхідні для розрахунку значень ζ_{ij} і коефіцієнтів α_i , наведено в таблиці 4.4.

Таблиця 4.4

v_j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
ζ_{0j}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ζ_{1j}	-4,5	-3,5	-2,5	-1,5	-0,5	0,5	1,5	2,5	3,5	4,5
ζ_{2j}	12	4	-2	-6	-8	-8	-6	-2	4	12
ζ_{3j}	-25,2	8,4	21	18,6	7,2	-7,2	-18,6	-21	-8,4	25,2
ζ_{4j}	43,2	-52,8	-40,8	7,2	43,2	43,2	7,2	-40,8	-52,8	43,2
ζ_{5j}	-60	140	-10	-110	-60	60	110	10	-140	60
$y_j \zeta_{0j}$	23	29	41	60	79	88	83	61	33	27
$y_j \zeta_{1j}$	-103,5	-101,5	-102,5	-90	-39,5	44	124,5	152,5	115,5	121,5
$y_j \zeta_{2j}$	276	116	-82	-360	-632	-704	-498	-122	132	324
$y_j \zeta_{3j}$	-579,6	243,6	861	1116	568,8	-633,6	-1543,8	-1281	-277,2	680,4
$y_j \zeta_{4j}$	993,6	-1531,2	-1672,8	432	3412,8	3801,6	597,6	-2488,8	-1742,4	1166,4
$y_j \zeta_{5j}$	-1380	4060	-410	-6600	-4740	5280	9130	610	-4620	1620

Легко перевірити, що для одержаних даних виконуються умови ортогональності, тобто суми значень ζ_{ij} у кожному рядку й суми за i добутоків вигляду $\zeta_{ij}\zeta_{kj}$ ($i \neq k$) дорівнюють нулю. За даними таблиці розраховуємо коефіцієнти α'_i (табл. 4.5). Оцінками дисперсії цих коефіцієнтів

є величини $\sigma_{\alpha'_i}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n (y_i - y_i^*)^2}{(n - q - 1) \sum_{j=1}^n \zeta_{ij}^2}$. Звідси за формулами (4.38) одержуємо

оцінки Y_i^* значень досліджуваної величини Y у точках $x = x_j$, які наведені в таблиці 4.3 і є достатньо близькими до її емпіричних значень.

Таблиця 4.5

i	0	1	2	3	4	5
$\sum_{j=1}^n \zeta_{ij}^2$	10	82,5	528	3088,8	16473,6	78000
$\sum_{j=1}^n y_j \zeta_{ij}$	524	121	-1550	-845,4	2968,8	2950
α'_i	53,5	1,466667	-2,93561	-0,2737	0,180216	0,037821
$\sigma_{\alpha'_j}^2$	0,428819	0,051978	0,008122	0,001388	0,00026	0,000055

5. МОДЕЛЮВАННЯ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ

Розглянемо загальну схему побудови математичних моделей на прикладі моделювання дефектів у кристалах. Для цього використовують такі методи:

- молекулярної динаміки (динамічний);
- варіаційний;
- Монте-Карло (статистичних випробувань);
- кінетичний.

5.1. Метод молекулярної динаміки

Цей метод використовується для розв'язування задачі про рух окремих атомів під впливом поля сил взаємодії атомів один з одним, інерції та зовнішніх сил, прикладених до твердого тіла, частиною якого є досліджувані атоми. Атоми описують як матеріальні точки, що мають маси. Загальна схема реалізації методу молекулярної динаміки є такою.

1. На першому етапі будують фізичну модель кристала. Її обирають у вигляді сукупності атомів, поведінка яких підпорядковується законам класичної механіки. Важливою частиною цього етапу є визначення складу досліджуваної системи.

2. На другому етапі здійснюють формалізацію моделі. Спочатку обирають потенціал взаємодії атомів один з одним. У випадку, коли тверде тіло містить атоми різних типів, задають декілька різних потенціалів. Їх кількість дорівнює кількості різних за складом можливих пар атомів. Наприклад, якщо є два типи атомів А і В, то необхідно задати три типи потенціалів (А-А, А-В та В-В). У першому наближенні припускають, що потенціали є центральними та парними. Тобто вважають, що потенціал взаємодії двох атомів залежить лише від відстані між ними і не залежить від орієнтації пари атомів, а також від наявності та розташування інших атомів. Потенціальну енергію системи визначають за формулою

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_j(t)|), \quad (5.1)$$

де $\mathbf{r}_i(t)$ – радіус-вектор i -го атома, $\varphi(r)$ – потенціальна енергія взаємодії пари атомів, що знаходяться на відстані r один від одного. Основні типи використовуваних потенціалів можна класифікувати так.

А. Потенціали, які відповідають відштовхуванню атомів один від одного на будь-яких відстанях між ними (рис. 5.1.а). Особливістю систем з потенціалами взаємодії такого типу є неможливість встановлення в них

рівноваги без зовнішніх впливів. Прикладами є потенціал кулонівської взаємодії двох частинок із зарядами одного знака та потенціал Борна-Майєра, який має вигляд:

$$U = A \exp[(r_1 + r_2 - r)/\rho], \quad (5.2)$$

де r_1, r_2 – радіуси взаємодіючих атомів, A та ρ – константи, що можуть бути розраховані за даними про стисливість кристала. Потенціал (5.2) використовують, якщо $r_1 + r_2 < r$.

Б. Потенціали, які відповідають відштовхуванню атомів один від одного при малих відстанях між ними ($r < r_0$) та їх притягненню один до одного при великих відстанях ($r > r_0$). Вигляд таких потенціалів наведено на рис. 5.1.б. У цьому випадку $r = r_0$ є рівноважною відстанню між атомами, яка відповідає стійкій рівновазі системи з двох атомів. Такі потенціали більш точно описують істинний характер взаємодії атомів, які відштовхуються один від одного при малих відстанях внаслідок деформації їх електронних оболонок і притягаються один до одного на великих відстанях через утворення ван-дер-ваальсових зв'язків між ними. Прикладами є потенціали Леннарда-Джонса та Морзе.

Потенціал Леннарда-Джонса можна записати у вигляді:

$$U = C \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^m - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^n \right], \quad (5.3)$$

де C – енергія зв'язку пари, n та m – цілі числа, які часто обирають такими: $m = 12, n = 6$.

Потенціал Морзе має вигляд

$$U = -2D \{ \exp[-\beta(r - r_0)] - 0,5 \exp[-2\beta(r - r_0)] \}, \quad (5.4)$$

де D – енергія зв'язку атомів при $T = 0$ К, β – параметр, що визначає "ширину" кривої $U(r)$. Така формула гарно описує поведінку реального потенціалу при великих відстанях між атомами, але дає велику похибку, якщо $r \rightarrow 0$. З цього випливає, що потенціал Морзе, у першу чергу, доцільно використовувати при моделюванні поведінки атомів у газах. В окремих випадках він дозволяє одержати придатні результати при моделюванні властивостей рідин та твердих тіл. Але його не рекомендується застосовувати у випадках, коли значення енергій взаємодії атомів на малих відстанях стають суттєвими, зокрема при моделюванні поведінки кристалів під впливом високого тиску.

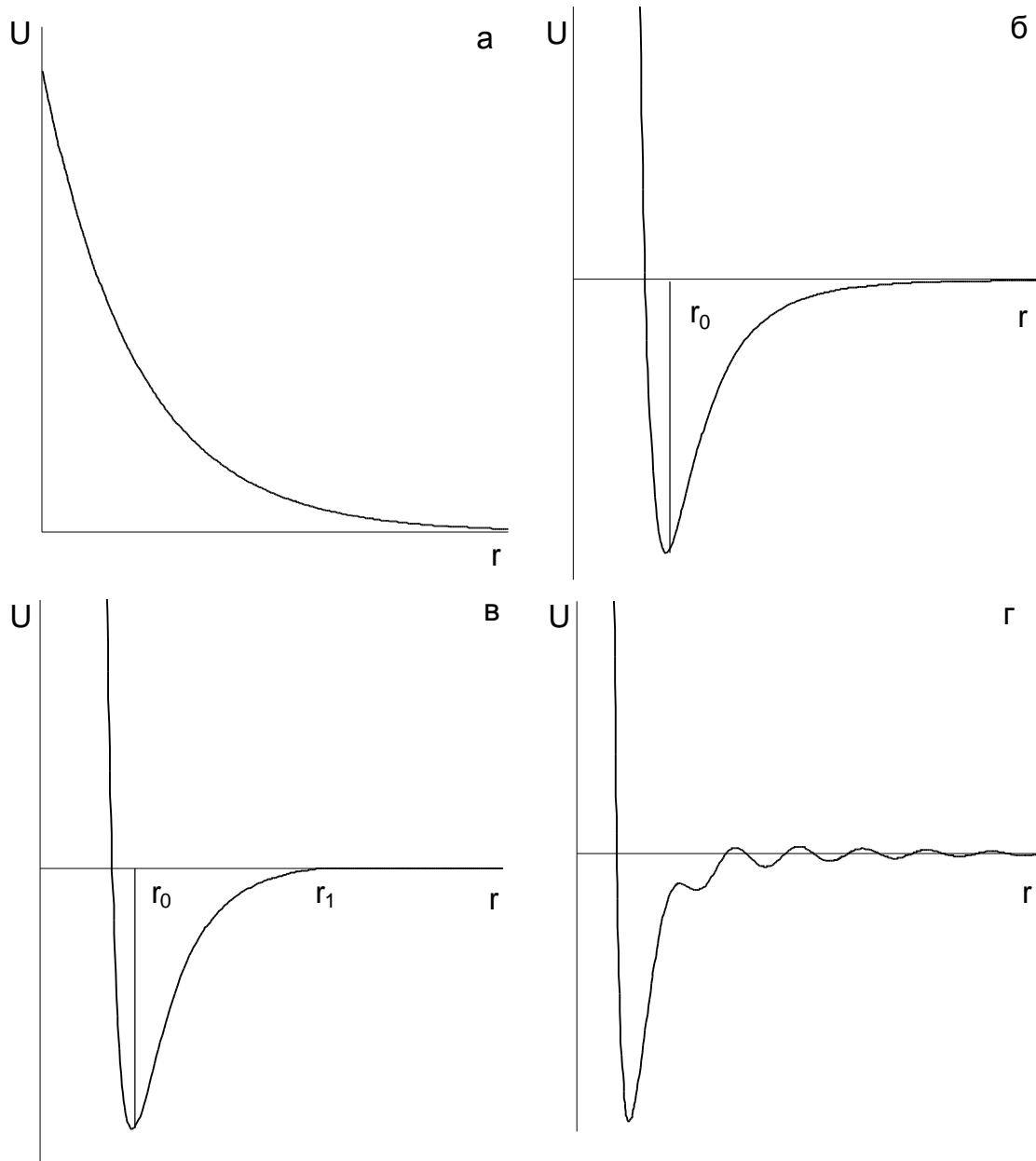


Рис. 5.1. Модельні потенціали, що використовуються при дослідженні кристалів

В. Потенціали типу Б, у яких при відстанях, більших за деяке r_1 , взаємодію вважають відсутньою (рис. 5.1.в). Це дозволяє зменшити потрібні для аналізу моделі ресурси за рахунок зневажання зв'язками, що не виявляють суттєвого впливу на досліджувану систему. Як r_1 можна обрати, зокрема, відстань, для якої потенціальна енергія взаємодії дорівнює середній кінетичній енергії атомів.

Г. Осцилюючі потенціали (рис. 5.1.г). У цьому випадку спостерігається чергування областей, де атоми відштовхуються один від одного, та областей, де вони притягуються. При цьому максимальні за модулем енергії взаємодії для окремих областей зменшуються зі збільшенням відстані

між атомами. Такі потенціали є характерними для так званої деформаційної взаємодії атомів у кристалах, зумовленої неоднорідністю деформації, що створюється відхиленнями від геометрично правильного розташування атомів у кристалічній решітці.

Наступним етапом розробки моделі є визначення кількості атомів, які будуть враховуватися при розрахунках (розмір розрахункової комірки). При цьому необхідно знайти компроміс між точністю результатів та потрібними ресурсами. Якщо розрахункова комірка буде малою, це призведе до збільшення похибки результатів і, можливо, до одержання якісно неправильних результатів. Якщо ж розрахункова комірка буде надмірно великою, то розрахунки потребуватимуть суттєвого збільшення обсягу необхідної пам'яті ЕОМ та часу. Крім того, при збільшенні розміру комірки похибка результатів може почати зростати внаслідок накопичення розрахункової похибки.

Зазвичай розрахункова комірка містить $10^3 - 10^6$ атомів. Це відповідає кубу, на ребрі якого вміщується від 10 до 100 атомів. Такий розмір комірки є малим порівняно з іншими характерними відстанями для більшості задач. Тому виникає проблема задання межових умов. Можливі шляхи її розв'язку будуть більш детально обговорені нижче.

Рух класичних частинок описується звичайними диференціальними рівняннями динаміки Ньютона. Як правило, необхідно розв'язати задачу Коші для цієї системи. Обрання початкових умов визначається досліджуваною проблемою. Якщо розрахункова комірка містить N однакових атомів, то конфігурацію системи, тобто положення усіх атомів у деякий момент часу, повністю характеризує набір $3N$ декартових координат x_j^i ($i = 1, 2, 3; j = 1, 2, \dots, N$). Система рівнянь руху має вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_j^i(t)}{dt} = F_j^i(t)/m; \\ \frac{dx_j^i(t)}{dt} = v_j^i(t); \\ x_j^i(0) = \alpha_j^i; \\ v_j^i(0) = \beta_j^i; \\ F_j^i(t) = - \sum_{k, k \neq j} \frac{\partial \varphi(|\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_k(t)|)}{\partial x_j^i}, \end{array} \right. \quad (5.5)$$

де α_j^i, β_j^i – початкові значення координат та проекцій швидкостей атомів, m – маса одного атома. Додавання у (5.5) виконується за всіма атомами розрахункової комірки та межевої області.

3. Розв'язок системи (5.5) не може бути одержаний у загальному вигляді. Для одержання конкретних часткових розв'язків слід використовувати обчислювальні методи. Зокрема, використовуючи метод центральних скінченних різниць, можна одержати такі вирази для розрахунку поточних значень координат та швидкостей атомів:

$$\begin{cases} x_j^i(t + \Delta t) = x_j^i(t) + v_j^i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t; \\ v_j^i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v_j^i\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + F_j^i(t)\Delta t/m, \end{cases} \quad (5.6)$$

де Δt – крок за часом.

При обранні величини Δt слід мати на увазі, що її збільшення веде до збільшення різниці між розв'язками системи (5.5) та скінченно-різницевого рівняння (5.6). З іншого боку, її зменшення призводить до зростання не тільки потрібних для аналізу моделі ресурсів, але й алгоритмічної та розрахункової похибок. Це ускладнює контроль погрішності моделювання й потребує додаткового використання неформальних методів. Одним з них може бути періодична перевірка виконання закону збереження енергії під час виконання розрахунків.

Більш високу точність забезпечує використання для розв'язування системи (5.5) одного з методів Рунге-Кута. Додатковою перевагою такого підходу є можливість відносно простої реалізації розрахунків зі змінним кроком. Але за інших рівних умов такі методи потребують більших ресурсів часу та пам'яті ЕОМ.

4. Наступним етапом є розробка алгоритму та комп'ютерних програм аналізу моделі. На сьогодні є досить велика кількість стандартних програм і пакетів програм, що реалізують метод молекулярної динаміки. Їх опис можна знайти у фаховій літературі.

5. Після розробки програми та здійснення розрахунків необхідно виконати перевірку адекватності моделі. Для цього треба визначити фізичні критерії адекватності. Проблема полягає у тому, що сьогодні не існує експериментальних методів, які б дозволяли визначити координати великої кількості атомів у заданий момент часу. Тому можливе лише непряме порівняння результатів моделювання з наявними емпіричними даними. Використовують декілька основних підходів до прямої перевірки адекватності моделі. У першому випадку перевіряють, чи не суперечать результати моделювання фундаментальним законам та принципам фізики, зокрема законам збереження, принципам прагнення системи до мінімуму енергії та максимуму ентропії тощо. При здійсненні такої перевірки необхідно ро-

зуміти, що усі закони мають виконуватися лише у межах заданої похибки моделювання.

Інший метод перевірки передбачає дослідження асимптотичних та межових властивостей моделі. У цьому випадку перевіряють, чи збігається поведінка моделі з поведінкою реальної системи або відомими теоретичними висновками при $t \rightarrow \infty$, $r \rightarrow \infty$ тощо. Наприклад, якщо моделюється розташування атомів поблизу точкового дефекту кристала, на великих відстанях від дефекту модель має призводити до такого розташування, яке спостерігається у бездефектному кристалі.

Ще один метод непрямой перевірки заснований на побудові додаткової моделі, яка дозволяє за одержаними на попередньому етапі результатами розрахувати фізичні властивості об'єкта дослідження, що можуть безпосередньо спостерігатися в експерименті. Його перевагою є можливість безпосереднього порівняння результатів моделювання з емпіричними даними. Проте слід мати на увазі можливість виникнення двох типів помилок. По-перше, у випадку, коли спостерігається суттєва розбіжність між порівнюваними результатами, неможливо без залучення додаткових даних визначити джерело помилки. Джерелом можуть бути базова модель, додаткова модель, а також суперечність цих моделей, тобто наявність у них припущень, що суперечать одне одному.

Наприклад, багато фізичних властивостей твердих тіл можуть досліджуватися в межах континуальної моделі, яка вважає тверде тіло неперервним середовищем. У такій моделі дефекти можна описати як неоднорідності середовища. Водночас багато фізичних властивостей кристалів не можна пояснити без використання атомістичних моделей їх побудови. Якщо для перевірки континуальної моделі використовувати такі властивості, відхилення результатів моделювання від емпіричних даних може виявитися зумовленим не недоліками базової або додаткової моделі, а саме їх несумісністю внаслідок розбіжності основних припущень.

Інший тип помилки може виникнути, якщо похибки базової та додаткової моделі компенсують одна одну. Відомим з історії фізики прикладом є класична теорія електричної провідності металів, розроблена П. Друде. Одним з її важливих результатів було знаходження співвідношення між питомою електропровідністю σ та коефіцієнтом теплопровідності χ металів:

$$\frac{\chi}{\sigma} = 3 \left(\frac{k}{e} \right)^2 T, \quad (5.7)$$

де k – стала Больцмана, e – заряд електрона, T – температура. Співвідношення (5.7) відоме у фізиці як закон Відемана–Франца. Його основний зміст полягає у тому, що відношення χ/σ пропорційне абсолютній темпе-

ратурі та є однаковим для всіх металів. Цей висновок добре узгоджується з емпіричними даними. Крім того, є досить добра кількісна відповідність між теорією та експериментом. Тому протягом певного часу модель Друде вважали адекватною.

В основі теорії Друде, в межах якої одержана формула (5.7), лежать такі припущення. Рух електронів у кристалі розглядається як рух частинок ідеального газу. За відсутності зовнішнього електричного поля їх рух є хаотичним тепловим рухом. Швидкості електронів та час їх вільного пробігу в моделі Друде приймалися однаковим для всіх електронів. Модель Друде була удосконалена Х. Лоренцем шляхом урахування реального розподілу електронів за швидкостями та часом вільного пробігу. Результатом цього стала заміна у формулі (5.7) коефіцієнта 3 на $3/2$. Таке уточнення моделі призвело до погіршення кількісної відповідності між експериментальними даними та теоретичними висновками. У подальшому була розроблена квантова теорія металів, у межах якої для цього коефіцієнта було одержане значення $\frac{\pi^2}{3} \approx 3,29$, яке є близьким до його значення в моделі Друде. Проте, квантова модель суттєво відрізняється від класичної за фізичним змістом. По-перше, з квантової теорії випливає, що в моделі Друде виникала компенсація помилок розрахунку середньої швидкості електронів та теплоємності електронного газу. виправлення однієї з них Лоренцем призвело до погіршення відповідності між теорією та експериментом. По-друге, в класичній теорії пропорційність між χ/σ і T пояснюється тим, що середня кінетична енергія електронів $\frac{3}{2}kT$ пропорційна температурі. У квантовій теорії середня кінетична енергія електронів практично не залежить від температури, але їй пропорційна теплоємність електронного газу.

6. Якщо модель визнана адекватною, то на останньому етапі виконується її оптимізація. У випадку застосування методу молекулярної динаміки найбільш типовими прийомами спрощення моделі є зменшення розміру розрахункової комірки, обрання більш простого модельного потенціалу, та спрощення межових умов. Після кожної внесеної до моделі зміни необхідно перевірити, чи залишилася модель адекватною. Якщо ні, то зроблене спрощення моделі є неприпустимим, і від нього треба відмовитися.

Прикладами проблем, для вивчення яких успішно використовували метод молекулярної динаміки, є дослідження розповсюдження каскадів зі-

ткнень при опромінюванні кристалів, розрахунок рівноважних конфігурацій атомів поблизу точкових дефектів, вивчення утворення та анігіляції точкових дефектів, визначення конфігурації атомів у ядрі дислокації тощо.

5.2. Варіаційний метод

Варіаційний метод (метод молекулярної статистики) використовують в основному для визначення конфігурацій атомів у положеннях стійкої або нестійкої рівноваги. Його сутність полягає в мінімізації потенціальної енергії системи взаємодіючих частинок. Розглянемо основні етапи й особливості побудови математичної моделі.

Побудова фізичної моделі та її формалізація здійснюються так само, як і в попередньому випадку. Далі ставиться задача знаходження мінімуму потенціальної енергії системи як функції координат усіх частинок. Ця функція є нелінійною і в загальному випадку багатоекстремальною. Її мінімізація відноситься до задач нелінійного програмування і здійснюється за допомогою відповідних методів оптимізації.

У стандартному програмному забезпеченні ПЕОМ, як правило, використовуються квадратичні методи другого порядку, зокрема методи Ньютона, Девідона, квазіньютонівські, спряжених градієнтів тощо. Наприклад математичний пакет MathCad і табличний процесор MS Excel, що входить до пакета MS Office 2000, містять вбудовані програми реалізації квазіньютонівської оптимізації та методу спряжених градієнтів. Серед великої кількості методів неможливо вибрати один чи декілька, які б були найкращими для усіх можливих випадків. У практиці часто використовують комбінації різних методів, які враховують специфіку задачі, що розв'язується. Однією зі складностей варіаційного методу є проблема формування умови закінчення розрахунків. Зазвичай таким критерієм є мала різниця значень потенціальної енергії чи мала зміна координат для двох послідовних кроків пошуку. В обох випадках можливі суттєві помилки, пов'язані з характером залежності потенціальної енергії від координат та особливостями методів оптимізації, що використовуються.

5.3. Обрання межових та початкових умов

При використанні методів молекулярної динаміки та варіаційного виникає проблема визначення додаткових умов на межі обраної розрахункової комірки. Зазвичай відокремлюють три області. Внутрішня область I є розрахунковою коміркою. Вона обмежена одним чи декількома шарами атомів

примежової області II. Кожен атом із цієї області взаємодіє хоча б з одним атомом внутрішньої області. Товщина області II визначається ефективним радіусом дії потенціалів, що використовуються. Зовнішня область III містить атоми, що не взаємодіють з атомами розрахункової комірки, але взаємодіють з атомами примежової області II. Зміщення атомів у цій області визначають за допомогою теорії пружності.

Розрізняють три типи межових умов.

1. **Жорсткі межові умови** використовують лише у варіаційному методі. Припускається, що примежові атоми зафіксовані у вузлах ідеальної чи пружно деформованої кристалічної решітки. Таке припущення є прийнятним, якщо похибка, пов'язана з неточністю координат примежових атомів, достатньо мала завдяки великій кількості шарів рухливих атомів, тобто при обранні достатньо великого розміру розрахункової комірки. У цьому випадку область III не відокремлюють.

2. **Гнучкі (динамічні) межові умови** більш адекватно відображають реальну поведінку атомів у примежової області. У цьому разі розподіл атомів примежовій області періодично приводять у відповідність з розподілом атомів розрахункової комірки. Це призводить до зміщення пружно взаємодіючих з ними атомів зовнішньої області. Використання гнучких межових умов ускладнює алгоритм розрахунків, але дозволяє суттєво зменшити розмір розрахункової комірки порівняно з попереднім випадком. Гнучкі межові умови використовують у більшості задач з розрахунку атомних конфігурацій біля дефектів як у варіаційному методі, так і в методі молекулярної динаміки.

3. **Періодичні межові умови** використовують, якщо у деякому напрямку за характером задачі, що розв'язується, має існувати період повної або наближеної ідентичності розподілу атомів. Такі умови імітують нескінченну періодичну кристалічну решітку кристала у визначених напрямках. У випадку наближеної ідентичності треба задавати період достатньо великим для забезпечення статистичності і зневажання локальними ефектами.

Суттєвий вплив на результати моделювання має також вибір початкових умов, тобто стартової конфігурації атомів. У методі молекулярної динаміки ця проблема розв'язується досить просто. Це зумовлено тим, що статистичні характеристики сукупності атомів, що встановлюються при достатньо великому часі спостереження, не залежать від початкових умов. Конкретні початкові умови задають, виходячи з вимог простоти й фізичної розумності. Наприклад, якщо моделюють розповсюдження каскаду зіткнень при опро-

мінюванні ідеального кристала, то в початковий момент часу зміщення і швидкості усіх атомів приймають рівними нулю і задають одному з атомів імпульс, що відповідає його зіткненню з опромінюючою частинкою. Якщо треба врахувати тепловий рух атомів, то їм задають випадкові початкові швидкості, розподіл яких збігається з розподілом Максвелла.

Більш складною є проблема обрання початкових умов у варіаційному методі. Оскільки у загальному випадку залежність потенціальної енергії системи від координат атомів не є унімодальною, невдале обрання початкових умов може призвести до знаходження не рівноважного, а метастабільного стану, тобто не глобального, а одного з локальних мінімумів потенціальної енергії. У деяких випадках результатом може стати одержання помилкового стаціонарного стану.

6. ДИНАМІЧНІ СИСТЕМИ

Залежно від цілей дослідження використовують різні методи опису та дослідження динамічних систем. Один з поширених методів ґрунтується на тому, що широкий клас динамічних систем у скінченновимірному лінійному наближенні можна записати у вигляді

$$\mathbf{R}(t) = \int_{-\infty}^t \mathbf{K}(\tau, t) \mathbf{I}(\tau) d\tau, \quad (6.1)$$

де \mathbf{I} – вектор вхідних впливів, \mathbf{R} – вектор реакцій системи, \mathbf{K} – матриця імпульсних перехідних функцій системи, τ, t – час. У нелінійному випадку додатково враховується залежність \mathbf{K} від \mathbf{I} .

Інші методи передбачають використання диференціальних рівнянь для опису динаміки систем. Нехай поведінка системи описується сукупністю рівнянь

$$\dot{r}_i = f_i(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad i = \overline{1, n}, \quad (6.2)$$

де $\mathbf{R} = (r_1, \dots, r_n)$ – вектор стану (точка) системи, α_i – параметри системи. Тоді стаціонарний стан є розв'язком рівняння

$$f_i(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k) = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Якщо розв'язок $r_i = a_i$ ($i = \overline{1, n}$) є особливою точкою, то питання про стійкість отриманого стаціонарного стану вирішується розрахунком коренів характеристичного рівняння

$$P(\lambda) = \det \{ A_{ik} - \lambda \delta_{ik} \} = 0, \quad A_{ik} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial r_k} \right)_{r_s = a_s}, \quad (6.3)$$

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

Стаціонарний стан є стійким, якщо $\operatorname{Re} \lambda_i < 0$ ($i = \overline{1, n}$), де λ_i – корені рівняння (6.3). Точки, в яких умови стійкості порушуються, називають критичними, або екстремальними. Сформульована умова не стосується стійкості $\mathbf{R}(t)$ при малих збуреннях $\delta \mathbf{I}$ вхідних змінних \mathbf{I} .

Найбільш розвиненою є теорія динамічних систем другого порядку.

Нехай (6.2) є автономною системою диференціальних рівнянь, у якій одна частина рівнянь

$$\dot{r}_{i1} = f_{i1}(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad i_1 = \overline{1, i_1^0} \quad (6.4)$$

описує повільні зміни, а інша –

$$\varepsilon \dot{r}_{i2} = \widetilde{f}_{i2}(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k), \quad i_2 = \overline{i_1^0 + 1, n}, \quad \varepsilon^{-1} \widetilde{f}_{i2} = f_{i2} - \quad (6.5)$$

швидкі. При $\varepsilon = 0$ системи (6.3, 6.4) переходять до системи

$$\begin{cases} \dot{r}_{i1} = f_{i1}(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k), \\ 0 = \widetilde{f}_{i2}(r_1, \dots, r_n; \alpha_1, \dots, \alpha_k), \end{cases} \quad (6.6)$$

яку називають виродженою. Систему (6.5) називають приєднаною. При дослідженні таких систем важливу роль відіграє теорема О.М. Тихонова:

Розв'язок повної системи (6.4, 6.5) наближається до розв'язку виродженої системи (6.6) при $\varepsilon \rightarrow 0$, якщо: а) розв'язок $\overline{r_{i_1^0+1}}, \dots, \overline{r_n}$ системи $\widetilde{f}_{i2}(r_1, \dots, r_n; a_1, \dots, a_k) = 0$ ($i_2 = \overline{i_1^0 + 1, n}$) є стійкою ізольованою точкою системи (6.5) за усіх значень $r_1, \dots, r_{i_1^0}$; б) початкові умови $r_{i_1^0+1}^0, \dots, r_n^0$

для системи (6.5) попадають до області впливу стійкої особливої точки; в) розв'язок повної системи та приєднаної системи (6.5) є єдиним, і праві частини цих систем неперервні.

Ця теорема дозволяє знизити порядок системи (6.2) і надає можливість її практичного дослідження. Загальна схема дослідження поведінки динамічних систем у цьому підході є такою.

1. Складають блок-схему структурно-функціональної організації досліджуваної системи.

2. Складають математичну модель системи з урахуванням доцільних обсягу та рівня алгоритмізації; виділяють системи швидких та повільних рухів; переводять систему до безрозмірного вигляду; знижують порядок системи рівнянь.

3. Досліджують стійкість рухів системи, визначають її стаціонарні точки, досліджують характер особливих критичних точок.

4. На основі якісного аналізу обирають параметри для кількісного дослідження моделі, отримують чисельні розв'язки і верифіцирують їх за експериментальними даними.

5. Оцінюють області та межі можливого застосування моделі, можливі результати і соціально-економічні наслідки її використання у фундаментальних та прикладних дослідженнях.

Висновки щодо стійкості динамічних систем можна отримати також на основі інтегрального представлення вигляду (6.1). При цьому функцію $K(t_0, t, \mathbf{R}_0)$ треба обрати так, щоб кожній інтегральній кривій вигляду (6.2) з початковим вектором $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}(t_0)$ відповідала в (1) вектор-функція

$$\mathbf{R}^0(t) = K(t_0, t, \mathbf{R}_0)\mathbf{R}^0, \quad K(t_0, t_0, \mathbf{R}_0)\mathbf{R}^0 = \mathbf{R}_0, \quad (6.7)$$

яку отримують, обираючи $\mathbf{I}(\tau) = \mathbf{R}^0\delta(\tau - t_0)$, де $\delta(\cdot)$ – дельта-функція Дірака. Виключаючи з (6.7) час t , отримують рівняння інтегральної кривої, записане у фазових змінних.

Особливим точкам автономної системи (6.2), яка не містить у правій частині часу t у явному вигляді, відповідають такі стани $\bar{\mathbf{R}}$ у просторі фазових змінних, за яких

$$\bar{\mathbf{R}}'(t) = K'_t(\bar{t}, t)K^{-1}(\bar{t}, t)\bar{\mathbf{R}} \equiv 0, \quad t \in (-\infty, \infty). \quad (6.8)$$

Особлива точка $\bar{\mathbf{R}}$ буде стійкою, якщо за будь-якого скільки завгодно малого $\varepsilon > 0$ знайдеться таке $\delta > 0$, що

$$\|\mathbf{R}_0 - \bar{\mathbf{R}}\| < \delta \Rightarrow \|\mathbf{R}^0(t) - \bar{\mathbf{R}}\| < \varepsilon, \quad (6.9)$$

де $\|\cdot\|$ є позначкою норми у просторі векторів. У інших випадках особлива точка буде нестійкою.

Умову (6.9) для представлення (6.1) згідно з теоремою Тихонова можна записати у вигляді

$$\left\| \left\{ r_{0i_2} \right\}_{i_0+1}^n - \left\{ \bar{r}_{0i_2} \right\}_{i_0+1}^n \right\| \leq \delta \Rightarrow \left\| \left\{ r_{i_2}^0(t) \right\}_{i_0+1}^n - \left\{ \bar{r}_{i_2} \right\}_{i_0+1}^n \right\| \leq \varepsilon, \quad (6.10)$$

яке виконується рівномірно відносно $\left\{ r_{i_1} \right\}_1^{i_0}$. Зі збільшенням t внаслідок зростання $r_{i_2}^0(t)$ друга нерівність у (6.10) виконується все швидше і за все більших значень δ . Це означає, що у граничному випадку достатньо розглядати лише розв'язок виродженої системи.

Таким чином, результати, одержувані за допомогою інтегральних та диференціальних представлень, за суттю є однаковими. Проте, у силу більшої стійкості результатів інтегрування порівняно з диференціюванням,

а також компактності запису використання інтегральних представлень має певні теоретичні та практичні переваги. Варто відзначити ще одну перевагу інтегральних представлень, що в деяких випадках має практичне значення. Вона полягає у тому, що диференціальне представлення у деяких випадках (у певних точках, у певні моменти часу) втрачає фізичний, економічний чи інший зміст внаслідок того, що використовуються функції, що мають у цих точках розриви. Інтегральні представлення зазвичай можуть застосовуватися й у таких випадках.

Протягом останніх кількох десятиріч набули розвитку деякі інші підходи до вивчення динамічних систем. Серед них варто відзначити такі.

Моделювання процесів самовідтворення, росту та розвитку систем на основі теорії автоматів призвело до розвитку алгоритмічно-автоматного опису динамічних систем, а в подальшому – до розвитку методів нейронних мереж і, зокрема, створення динамічних перцептонів, призначених для моделювання інтелектуальних динамічних систем, структур складних систем тощо.

Важливий клас моделей динамічних систем присвячений аналізу квазістохастичної поведінки детермінованих моделей (дивним аттракторам). Встановлено, що деякі динамічні системи за певних умов породжують рухи, що можна розглядати як випадкові (квазістохастичні). Найбільш дослідженою є модель Лоренца, що описує теплову конвекцію між двома площинами з різною температурою. Вона може бути записана у такий спосіб:

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x), \\ \dot{y} = rx - y - xz, \\ \dot{z} = -bz + xy, \end{cases} \quad (6.11)$$

де x – інтенсивність конвекційного перенесення, y – різниця між спадними та висхідними потоками тепла, z – відхилення вертикального розподілу температури від рівноважного лінійного профілю, σ – число Прандтля, r – число Релея, b – стала, що характеризує розміри системи.

При $b = 8/3$, $\sigma = 10$ і r у межах $14 - 48,5$ система (6.11) має різноманітні осцилюючі розв'язки, у тому числі й дивні аттрактори. При $r = 28$ траєкторії нерегулярно переходять з одного півпростору в інший.

Встановлено, що складну квазістохастичну поведінку за певних умов виявляють багато фізичних, хімічних, біологічних, технічних, економічних, екологічних та інших систем, у тому числі в одно- та двовимірному випадках. З виникненням дивних аттракторів пов'язані такі властивості динамічних систем, як ергодичність, перемішування, гіперболічність та інші.

Під ергодичністю розуміють збіг середніх за часом значень із середніми за фазовим простором. Область фазового простору називають областю із перемішуванням, якщо у її довільній підобласті є точки фазової траєкторії, що проходять через будь-яку іншу підобласть даної області. Гіперболічність системи полягає в тому, що всі фазові траєкторії динамічної системи є сідловими, а стійка та нестійка сепаратриси неперервно залежать від траєкторій. Виявлення таких властивостей є доведенням необхідної й достатньої умов наявності квазістохастичних розв'язків.

Важливою частиною теорії динамічних систем є теорія катастроф (теорія особливостей диференційованих відображень), що виникла на стику алгебри, аналізу та топології. Ця теорія розглядає поведінку розв'язків системи

$$\dot{q}_i = -\frac{\partial v(\{q_i\}, \mu)}{\partial q_i} \quad (6.12)$$

при повільному змінюванні параметра μ . Під катастрофами розуміють поведінку розв'язків поблизу точок біфуркацій, тобто таких точок простору параметрів системи, де спостерігаються втрата структурної стійкості та розгалуження розв'язків.

Ще одним напрямом розвитку математичного моделювання динамічних систем є підхід, що ґрунтується на моделях автохвильових процесів. Такі процеси можуть виникати й розповсюджуватися в активних кінетичних середовищах внаслідок втрати стійкості однорідного стану. Кожен елемент такого середовища є джерелом енергії і взаємодіє із сусідніми елементами через процеси перенесення. Під автохвильовими процесами розуміють також хвилі в активних середовищах, що самопідтримуються і зберігають свої характеристики (період, довжина хвилі, амплітуда й форма) сталими за рахунок розподіленого в середовищі джерела енергії. За певних умов ці характеристики залежать тільки від локальних властивостей середовища й не залежать від початкових умов. На достатньому віддаленні від меж середовища, вони не залежать також від межових умов і лінійних розмірів системи. Математичною моделлю активної кінетичної системи є рівняння вигляду

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = f_i(\{q_i\}) + D_i \nabla^2 q_i, \quad (6.13)$$

де $f_i(\{q_i\})$ – нелінійні функції, що описують взаємодію q_i компонент.

У межах моделі (6.13) можна описати збурення, які розповсюджуються у вигляді імпульсу, що біжить, генерацію хвиль автономними джерелами імпульсної активності, стоячі хвилі, синхронні автохвилі у всьому

просторі, квазістохастичні хвилі, дисипативні структури тощо. Дані типи хвиль визначаються переважно властивостями параболічних рівнянь і розповсюджуються в активних (неконсервативних) системах. Це відрізняє їх від хвиль солітонного типу, що визначаються переважно властивостями гіперболічних хвиль і можуть розповсюджуватися в консервативних середовищах.

Усе більшого значення в моделюванні динамічних систем набувають методи, що ґрунтуються на теоретико-груповому підході. Це визначається необхідністю врахування інформації про властивості симетрії досліджуваних об'єктів. У рамках цього підходу, зокрема, показано, що морфологічна подібність змін пропорцій окремих частин динамічної системи означає афінну еквівалентність форм, що аналізуються.

Методи теорії алгебраїчних інваріантів широко використовуються в задачах автоматичного управління. Зокрема, вони дозволяють визначити умови розв'язності задач інваріантності, чутливості й автономності при зовнішніх та параметричних впливах. Ці умови виражаються через алгебраїчні інваріанти групи лінійних перетворень рівнянь динамічної системи.

Важливим напрямом асимптотичних методів теорії нелінійних коливань є метод малого параметра Крилова–Боголюбова–Мітропольського (КБМ). Останнім часом асимптотичні методи набули подальшого узагальнення та розвитку під назвою методів розв'язування жорстких систем. В околі критичної точки динамічна система (6.6) часто може бути записана у вигляді

$$\dot{\mathbf{R}} = \varepsilon f_1(\mathbf{R}, t), \quad (6.14)$$

де ε – достатньо малий параметр. Тому ефективними є асимптотичні методи, сутність яких полягає в побудові наближених розв'язків, що задовольняють (6.14) з похибкою ε^{m+1} , де m – порядок наближення на достатньо великому часовому інтервалі. Рівняння першого наближення має вигляд

$$\dot{\xi} = \varepsilon f_0(\xi), \quad f_0(\xi) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\mathbf{R}, t) dt. \quad (6.15)$$

За достатньо загальних умов справедливо:

$$|\mathbf{R}(t) - \xi(t)| < \delta, \quad 0 < t < \frac{L}{\varepsilon}, \quad 0 < \varepsilon < \varepsilon_0, \quad (6.16)$$

де \mathbf{R} , ξ – розв'язки систем (6.14) та (6.15), відповідно, δ – скільки завгодно мале додатне число, L – скільки завгодно велике число, $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\delta, L)$.

ЛАБОРАТОРНИЙ ПРАКТИКУМ

Вступ

Метою виконання лабораторного практикуму з математичного моделювання фізичних систем і процесів є набуття студентами практичних навичок розробки й дослідження математичних моделей.

Завдання та основні етапи виконання лабораторних робіт

При виконанні лабораторних робіт студенти повинні:

1. Ознайомитися з теоретичним матеріалом, що стосується фізичної системи або процесу, модель якого буде розроблятися. Зокрема, вивчити основні визначення, закони, рівняння, формули відповідного розділу фізики, межі їх застосування.
2. Визначити мету дослідження системи (процесу).
3. Розробити фізичну модель досліджуваної системи або процесу. Розроблення фізичної моделі системи передбачає виділення основних елементів досліджуваної системи, основних зв'язків (взаємодій) між цими елементами, а також суттєвих для досліджуваної системи процесів взаємодій системи із зовнішнім середовищем. Розроблення фізичної моделі процесу додатково повинно включати визначення механізму процесу, тобто його елементарних стадій та їх послідовності, факторів, що впливають на швидкість процесу. Розроблення фізичної моделі передбачає також визначення тих фізичних законів, які необхідно враховувати при аналізі досліджуваної системи або процесу.
4. Розробити математичну модель системи, що вивчається. Це передбачає вибір основних рівнянь, нерівностей та інших співвідношень, які характеризують досліджувану систему та її динаміку, визначення початкових і граничних умов, інших обмежень на параметри системи. Слід мати на увазі, що форма запису деяких рівнянь може залежати від обраної системи одиниць вимірювань. При аналізі моделей фізичних систем далі використовується тільки система СІ.
5. Обрати метод чисельного аналізу математичної моделі, побудувати алгоритм аналізу, написати комп'ютерну програму, яка реалізує цей алгоритм, і дослідити поведінку системи в заданих умовах. Обрання методу чисельного аналізу має бути обґрунтованим з точки зору його збіжності, стійкості, точності та ефективності. Для написання програм рекомендується використовувати мову C++. Дозволяється використання інших мов високого рівня

(C, Pascal, Fortran тощо), а також прикладних математичних пакетів MathCad, MathLab, Maple та інших.

6. Зробити висновок про адекватність обраних фізичної та математичної моделей і можливість застосування обраного методу чисельного аналізу.
7. Підготувати письмовий звіт про виконання роботи. У звіті необхідно навести загальну характеристику об'єкта дослідження, обрану фізичну модель та її обґрунтування, обрану математичну модель та її обґрунтування, загальну характеристику обраного обчислювального методу дослідження математичної моделі, обґрунтування його вибору, алгоритм дослідження математичної моделі, відповідні комп'ютерні програми, основні результати дослідження, висновок про можливість застосування обраного методу для вивчення наданого об'єкта дослідження.

Теми робіт. Для виконання лабораторних робіт студентам пропонуються такі теми:

- задача трьох тіл: моделювання траєкторії руху;
- моделювання хвильових функцій мікросистеми;
- моделювання перехідних явищ у провідниках (розрахунок часової залежності сили струму через провідник);
- моделювання температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника;
- моделювання згасаючих коливань;
- побудова й дослідження випадкових послідовностей.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1

Задача трьох тіл: моделювання траєкторії руху

Завданням цієї роботи є розрахунок траєкторії руху планети навколо іншого небесного тіла у випадку, коли є ще одне небесне тіло, яке істотно впливає на цю траєкторію. Прикладами таких систем можуть бути рух Місяця навколо Сонця, штучних космічних апаратів, комет тощо.

Першим етапом виконання лабораторної роботи є побудова фізичної моделі досліджуваної системи. Розглянемо цей етап більш детально на прикладі моделювання траєкторії руху Місяця навколо Сонця.

Розробка фізичної моделі починається з визначення складу системи. Як супутник Землі, Місяць входить до складу Сонячної системи, яка, у свою чергу, є підсистемою більш крупних зоряних систем. Проте не всі об'єкти цих систем будуть суттєво впливати на рух Місяця. При моделюванні його руху до складу системи, очевидно, слід включити сам Місяць (М), Землю (Е) та Сонце (S). Питання щодо необхідності включення інших небесних тіл (В) до складу системи має вирішуватися залежно від мети моделювання. Критерієм впливу цих тіл на рух Місяця може служити

відношення $\frac{a_B}{a_E} = \frac{M_B r_E^2}{M_E r_B^2}$, де a_B і a_E – прискорення, що набуває Місяць внаслідок його гравітаційної взаємодії з тілом, яке розглядається, та Землею,

M_B та M_E – маси тіла і Землі, r_B та r_E – мінімальні відстані від Місяця до тіла і до Землі. Маси небесних тіл та Землі містяться в навчальній і довідковій астрономічній літературі. Дані про відстані між Місяцем та іншими небесними тілами є у фахових виданнях, які можуть бути важкодоступними. Проте ці величини можна оцінити таким чином. Відстані від Місяця до інших планет Сонячної системи можна вважати великими порівняно з відстанню від нього до Землі. Тому вони будуть близькі до відстаней цих планет від Землі. Вони будуть мінімальні, якщо Земля та планета знаходяться з одного боку від Сонця на одній прямій з ним. Орбіти планет Сонячної системи у першому наближенні можна вважати коловими. Тому мінімальні відстані будуть дорівнювати різниці між радіусами орбіт планет і радіусом орбіти Землі. Значення цих параметрів містяться у навчальних та довідкових виданнях з астрономії. Критерієм слабкості впливу планети на рух Місяця можна вважати виконання нерівності $a_B/a_E < \alpha$, де значення α обирається залежно від мети моделювання. Воно може, наприклад, дорівнювати 0,001 – 0,01. Значення параметра α має бути тим нижчим, чим більше бажана точність результату, а також чим більше період часу, протягом якого необхідно дослідити траєкторію руху.

Наступним кроком побудови моделі є визначення зв'язків між елементами системи, тобто характеру взаємодії Місяця з іншими тілами, які ми включили до складу досліджуваної системи. Найбільш важливою буде гравітаційна взаємодія. Залежно від потрібної точності моделі гравітаційну взаємодію можна описувати за допомогою закону всесвітнього тяжіння або за допомогою загальної теорії відносності. Можна вважати, що поправка, яку дає остання, у більшості випадків не суттєва, тобто її можна не враховувати. Тоді сила, яка діє на Місяць з боку іншої планети (P), буде дорівнювати

$$\mathbf{F} = -G \frac{M_p m}{r_{PM}^3} \mathbf{r}_{PM}, \quad (\text{Л1.1})$$

де $G = 6,673 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{кг}^{-2}$ – гравітаційна стала, m – маса Місяця, \mathbf{r}_{PM} – радіус-вектор, проведений від планети до Місяця, r_{PM} – його довжина.

Закон всесвітнього тяжіння сформульовано для матеріальних точок, тому перед застосуванням треба визначити можливість його використання у вигляді (Л1.1). Є три основних джерела можливих помилок. По-перше, теорія дозволяє використовувати звичайну форму закону для опису взаємодії неточкових тіл, які мають форму кулі. Форми Місяця, Землі, Сонця та інших небесних тіл дещо відрізняються від кульової. Цим можна знехотувати при аналізі руху планет. Але якщо розраховуються траєкторії штучних супутників Землі та інших об'єктів, що знаходяться на малих, порівняно з радіусами планет, відстанях від них, відмінність форми планети від кульової може стати суттєвим джерелом похибок. По-друге, внаслідок того, що вони не є точковими тілами, взаємодія може призводити до внутрішнього перерозподілу мас цих тіл, а також до зміни їх обертового руху, що внаслідок дії законів збереження буде відображатися й на їх орбітальному русі. Необхідність врахування відповідних ефектів залежить від мети моделювання і потрібної точності розрахунків. По-третє, слід враховувати вибір системи відліку, в якій розв'язується задача. Якщо обирається геліоцентрична система, тобто Сонце поміщається в початок координат, то система відліку буде неінерційною завдяки галактичному руху Сонця і його руху внаслідок взаємодії з планетами Сонячної системи. Тобто при розрахунку сил, що діють на Місяць та інші планети, необхідно до сили гравітаційної взаємодії додати силу інерції, зумовлену прискоренням рухом системи відліку. Якщо ж розглядати рух Місяця в інерційній системі відліку, то треба враховувати рух Сонця відносно цієї системи. Ці поправки будуть відносно малими, тому в першому наближенні ними можна знехотувати. Але при точних розрахунках їх потрібно враховувати.

Виходячи з наведеного вище, математичну модель руху Місяця можна записати у такому вигляді (для випадку, коли враховується лише його взаємодія із Сонцем та Землею і нехтується неінерційністю геліоцентричної системи відліку):

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mathbf{r}_M}{dt^2} = -G \left(\frac{M_E \mathbf{r}_{EM}}{r_{EM}^3} + \frac{M_S \mathbf{r}_{SM}}{r_{SM}^3} \right), \\ \frac{d^2 \mathbf{r}_E}{dt^2} = -G \left(\frac{m \mathbf{r}_{ME}}{r_{ME}^3} + \frac{M_N \mathbf{r}_{SE}}{r_{SE}^3} \right), \\ \mathbf{r}_M(t = t_0) = \mathbf{r}_{M0}, \\ \mathbf{v}_M(t = t_0) = \mathbf{v}_{M0}, \\ \mathbf{r}_E(t = t_0) = \mathbf{r}_{E0}, \\ \mathbf{v}_E(t = t_0) = \mathbf{v}_{E0}. \end{cases} \quad (\text{Л1.2})$$

Для чисельного аналізу цієї моделі необхідно перейти від векторної форми запису до скалярної. У загальному випадку кожне з рівнянь системи розпадається ще на три. Наприклад, для першого рівняння одержимо:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_M}{dt^2} = -G \left[\frac{M_E}{r_{EM}^3} (x_M - x_E) + \frac{M_S}{r_{SM}^3} x_M \right]; \\ \frac{d^2 y_M}{dt^2} = -G \left[\frac{M_E}{r_{EM}^3} (y_M - y_E) + \frac{M_S}{r_{SM}^3} y_M \right]; \\ \frac{d^2 z_M}{dt^2} = -G \left[\frac{M_E}{r_{EM}^3} (z_M - z_E) + \frac{M_S}{r_{SM}^3} z_M \right]. \end{cases} \quad (\text{Л1.3})$$

Для задачі, що розглядається, можна прийняти, що орбіти, за якими рухаються Місяць навколо Землі та Земля навколо Сонця, лежать у одній площині. Тоді ми одержимо плоску задачу і достатньо буде замінити кожне векторне рівняння на два скалярних. Схема розв'язування системи (Л1.2) після її переведення у скалярну форму може бути такою. На першому етапі задають початкові умови, а саме початкові координати Місяця і Землі та початкові проекції їх швидкостей. Початкові координати зручно обрати такими, щоб у момент $t = 0$ Сонце, Місяць та Земля розміщувалися вздовж однієї прямої. Тоді ця пряма може бути обраною як одна з вісей координат, наприклад, як вісь x . Початковою координатою Землі x_E доцільно обрати величину афелію або перигелію Земної орбіти. Для одержання початкової координати Місяця x_M потрібно до координати Землі додати

середній радіус орбіти Місяця. Початкові швидкості Землі та Місяця будуть спрямовані перпендикулярно вісі x . Зневажаючи несталість кутових швидкостей орбітальних рухів Землі та Сонця, можна прийняти:

$$v_{yE} = \frac{2\pi R_E}{T_E}; \quad v_{yM} = v_{yE} + \frac{2\pi R_M}{T_M}, \quad (Л1.4)$$

де R_E та R_M – відповідно середні радіуси орбіт Землі та Місяця, T_E і T_M – періоди обертання Землі навколо Сонця та Місяця навколо Землі. Слід відзначити, що, оскільки орбіти Місяця та Землі близькі до колових, їхні початкові швидкості будуть близькими до значень перших космічних швидкостей для систем "супутник – Земля" і "супутник – Сонце" при відповідних відстанях до Землі і Сонця. Як відомо, перші космічні швидкості визначають межу між замкненими (для $v \geq v_{1к}$) і незамкненими (для $v < v_{1к}$) траєкторіями руху супутника. Тому невелика помилка у визначенні початкових швидкостей може призвести до якісної зміни розрахованої траєкторії руху.

Після визначення початкових координат та проекцій швидкостей можна розрахувати проекції прискорень Місяця та Землі у початковий момент часу за формулами систем (Л1.2) та (Л1.3). Далі потрібно задати крок Δt і організувати цикл за часом. Умовою кінця циклу може бути досягнення заданого часу руху або проходження Місяцем одного чи декількох повних обертів навколо Сонця.

У найпростішому випадку застосування методу Ейлера на кожному кроці потрібно виконати такі дії.

1. Розрахувати нові значення координат Землі та Місяця:

$$\begin{cases} x_E^{i+1} = x_E^i + v_{xE}^i \Delta t + a_{xE}^i \Delta t^2 / 2; \\ x_M^{i+1} = x_M^i + v_{xM}^i \Delta t + a_{xM}^i \Delta t^2 / 2; \\ y_E^{i+1} = y_E^i + v_{yE}^i \Delta t + a_{yE}^i \Delta t^2 / 2; \\ y_M^{i+1} = y_M^i + v_{yM}^i \Delta t + a_{yM}^i \Delta t^2 / 2. \end{cases} \quad (Л1.5)$$

2. Розрахувати нові значення проекцій швидкостей Землі та Місяця:

$$\begin{cases} v_{xE}^{i+1} = v_{xE}^i + a_{xE}^i \Delta t; \\ v_{xM}^{i+1} = v_{xM}^i + a_{xM}^i \Delta t; \\ v_{yE}^{i+1} = v_{yE}^i + a_{yE}^i \Delta t; \\ v_{yM}^{i+1} = v_{yM}^i + a_{yM}^i \Delta t. \end{cases} \quad (Л1.6)$$

3. Розрахувати нові значення проекцій прискорень Землі та Місяця.

4. Додати час Δt і перейти до наступного кроку циклу.

На рис. Л1.1 наведено фрагменти траєкторій руху трьох взаємодіючих тіл.

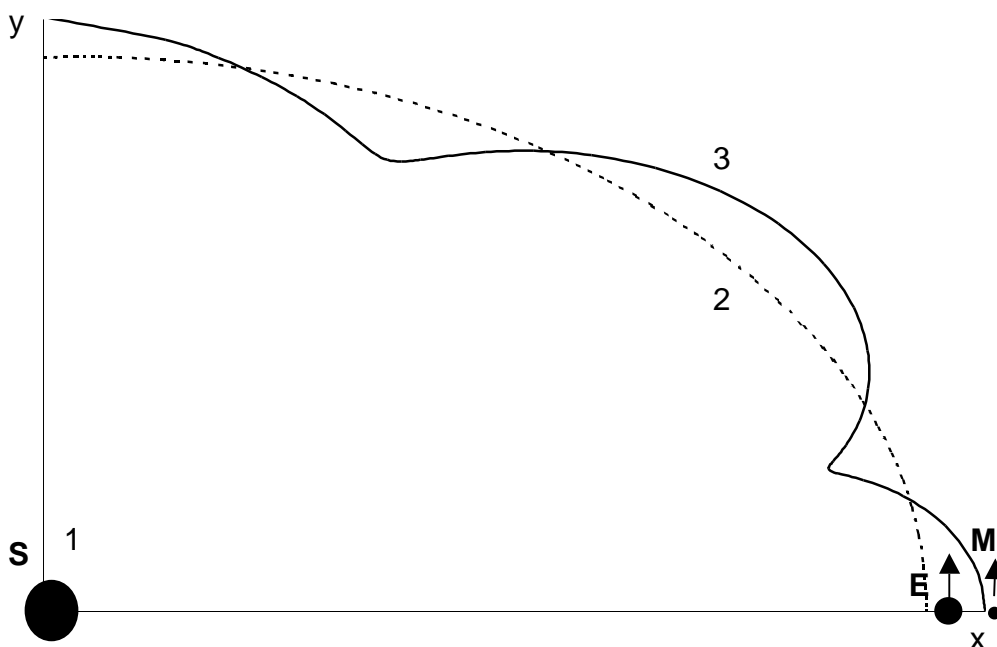


Рис. Л1.1. Результати розрахунку фрагментів траєкторій руху трьох взаємодіючих тіл

Точками і стрілками позначені початкові координати й напрямки руху тіл.

Для першого тіла початкова швидкість дорівнювала нулю. Під час розрахунків може виникнути така розрахункова помилка. Внаслідок скінченності шагу за часом i , відповідно, скінченності переміщень і прирощень швидкостей у деякий момент Місяць може виявитися занадто близьким до Землі або Земля виявиться занадто близькою до Сонця. У цьому випадку на наступному кроці вони одержать великі прирощення швидкостей, а далі змістяться на великі відстані від центрів орбіт. На цих відстанях сила їх притягання до Землі або Сонця суттєво зменшиться, і вони не зможуть повернутися на свої орбіти. Для запобігання виникненню такої помилки необхідно обирати невеликий крок за часом, а також ввести додаткові умови закінчення розрахунків у випадках, коли Місяць наблизиться до Землі або Земля наблизиться до Сонця на відстані менші, ніж задані величини.

Контрольні запитання

1. Сформулювати закон всесвітнього тяжіння у векторній формі й у проєкціях на вісі координат для інерційної та геліоцентричної систем відліку.
2. Оцініть похибку, що виникає у випадку, коли геліоцентрична система вважається інерційною.
3. За яких умов закон всесвітнього тяжіння має вигляд (Л1.1)?
4. Сформулювати критерії відбору тіл, що входять до складу досліджуваної системи при вивченні руху планет.
5. Оцінити похибку, що пов'язана з обмеженням складу системи.
6. Як формулюються початкові умови при розв'язуванні рівнянь руху в системі трьох тіл?
7. Які типи траєкторій руху можливі в системі двох тіл? Як тип траєкторії залежить від початкових умов? Які типи траєкторій будуть можливими в системі трьох тіл?
8. Перелічити основні методи чисельного розв'язування рівнянь руху в системі трьох тіл, дати порівняльну характеристику цих методів.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2

Моделювання хвильових функцій мікросистеми

Завданням цієї роботи є побудова функцій просторового розподілу щільності ймовірності місцезнаходження мікрочастинки. Для цього потрібно провести моделювання хвильової функції мікрочастинки.

Розглянемо проблему моделювання хвильових функцій на прикладі атома водню. Хвильова функція у загальному випадку знаходиться як розв'язок рівняння Шредингера, який задовольняє певним додатковим умовам. Зокрема, хвильова функція повинна бути однозначною, безперервною і скінченною (можливо, за винятком окремих особливих точок). Крім того, вона повинна мати неперервну і скінченну похідну.

Як фізичну модель системи розглянемо ізольований атом водню, тобто такий атом, на який не діють ніякі зовнішні поля та частинки. Будемо вважати, що атом знаходиться у вакуумі, а маса його ядра є нескінченно великою. Перше припущення дає можливість нехтувати відмінністю діелектричної проникності середовища від одиниці і досить добре виконується для атомів, що знаходяться в повітрі або у вакуумі. Друге припущення дає змогу нехтувати рухом ядра. Будемо також вважати, що між ядром та електроном діють тільки кулонівські сили, а заряд ядра дорівнює Ze . Останнє припущення дає можливість застосовувати одержувані результати не тільки для атома водню, але також і для воднеподібних систем. Ми також не будемо враховувати релятивістські поправки.

У випадку, що розглядається, рівняння Шредингера, записане у сферичних координатах (r, θ, φ) , має вигляд:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi, \quad (Л2.1)$$

де: ψ – хвильова функція;
 $\hbar = 1,05449 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – стала Планка;
 E – енергія атома;
 $e^2 = e^2 / (4\pi\epsilon_0)$;
 $e = 1,60210 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд електрона;
 Z – заряд ядра;
 $m_e = 9,10953 \cdot 10^{-31}$ кг – маса спокою електрона;
 $\epsilon_0 = 8,85419 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – електрична стала.

Розв'язок рівняння (Л2.1) має вигляд:

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (\text{Л2.2})$$

де n, l, m – квантові числа ($n = 1, 2, 3, \dots; l = 0, 1, 2, \dots, n - 1; m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, l - 2, l - 1, l$);

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (\text{Л2.3})$$

$P_l^m(\cos\theta)$ – приєднані функції Лежандра (вирази $Y_l^m(\theta, \varphi)$ для деяких значень l, m наведено в додатку 1),

$$R_{n,l}(r) = a^{-3/2} N_{n,l} F_{n,l} \left(\frac{2r}{na} \right), \quad (\text{Л2.4})$$

$$a = \frac{a_0}{Z} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Z m_e e^2}, \quad (\text{Л2.5})$$

a_0 – перший борівський радіус,

$$N_{n,l} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \quad (\text{Л2.6})$$

$$F_{n,l}(x) = x^l e^{-x/2} Q_{n-l-1}^{(2l+1)}(x), \quad (\text{Л2.7})$$

$$\begin{aligned} Q_s^{(q)}(x) &= e^x x^{-q} \frac{d^s}{dx^s} (e^{-x} x^{q+s}) = \\ &= (-1)^s \left[x^s - \frac{s(q+s)}{1!} x^{s-1} + \frac{s(s-1)(q+s)(q+s-1)}{2!} x^{s-2} - \dots \right] \end{aligned} \quad (\text{Л2.8})$$

узагальнені поліноми Лагерра (значення функції $R_{n,l}(r)$ для деяких значень n, l наведено в додатку 2).

Розв'язку (Л2.2) відповідають рівні енергії воднеподібного атома:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} . \quad (\text{Л2.9})$$

У деяких випадках буває необхідно врахувати скінченність маси ядра. Наприклад, це може статися при моделюванні воднеподібних систем з близькими значеннями мас частинок, таких як позитроній і мюоній. Така необхідність виникає також при дослідженні ізотопних ефектів, тобто впливу маси ядра ізотопа на енергетичні спектри та інші характеристики мікрочастинок. У цьому випадку наведені вище вирази можна застосовувати після заміни маси електрона на його приведену масу μ , яка може бути знайдена з виразу

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} , \quad (\text{Л2.10})$$

де M – маса ядра.

Фізичний зміст має не хвильова функція, а її добуток на комплексно спряжену функцію. Така функція визначає щільність імовірності $D(r, \theta, \varphi)$ знаходження частинки в заданій точці простору. У сферичних координатах

$$D(r, \theta, \varphi) = \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) r^2 \sin \theta . \quad (\text{Л2.11})$$

Таким чином, математична модель складається з системи рівнянь (Л2.2 – Л2.8), (Л2.11). Завданням дослідження може бути вивчення просторового розподілу щільності ймовірності, яке може бути подане як система перерізів електронної хмари площинами, що паралельні або перпендикулярні до вісі її симетрії. Важливою задачею є також побудова поверхонь, на яких функція $D(r, \theta, \varphi)$ має максимальні значення.

Як приклад розглянемо випадок $n = 2, l = 1, m = 0$. У цьому разі

$$\psi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \frac{2}{[3(2a)^3]^{1/2}} \frac{r}{2a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right), \quad (\text{Л2.12})$$

$$\psi^* \psi = \frac{r^2}{32\pi a^5} \cos^2 \theta \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (\text{Л2.13})$$

$$D(r, \theta, \varphi) = D(r, \theta) = \frac{r^4}{32\pi a^5} \cos^2 \theta \sin \theta \exp\left(-\frac{r}{a}\right). \quad (\text{Л2.14})$$

З (Л2.14) видно, що у цьому випадку щільність імовірності не залежить від кута φ . Тобто функція $D(r, \theta, \varphi)$ буде мати радіальну симетрію відносно вісі z . Таким чином, достатньо буде побудувати функцію щільності ймовірності для перерізу xOz . Кут θ може змінюватися від 0 до π . Оскільки $\sin \theta = \sin(\pi - \theta)$ та $\cos^2 \theta = \cos^2(\pi - \theta)$, функція $D(r, \theta, \varphi)$ буде симетричною відносно площини xOy .

Максимального значення $D(r, \theta, \varphi)$ досягне при $\theta = \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx 0,62$ рад та $\theta = \pi - \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx 2,53$ рад (для $r = \text{const}$). Крім того, функція $D(r, \theta, \varphi)$ немонотонно залежить від r і має максимум при $r = 4a$ (для $\theta = \text{const}$). При $r = 0$ $D(r, \theta, \varphi) \equiv 0$. При $r \rightarrow \infty$ $D(r, \theta, \varphi) \rightarrow 0$.

Контрольні запитання

1. Який фізичний зміст має хвильова функція?
2. Як знайти ймовірність знаходження мікрочастинки у визначеній області простору?
3. Які припущення робляться при розрахунку хвильових функцій електронів у воднеподібних атомах?
4. Записати рівняння Шредингера і пояснити його фізичний зміст.
5. Чому рівняння Шредингера мають розв'язок лише для дискретного набору значень енергії мікрочастинки?
6. Які квантові числа визначають хвильову функцію мікрочастинки?
7. Яку форму мають основні типи електронних орбіталей в атомі водню?
8. Як побудувати двовимірні проекції електронних орбіталей?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3

Моделювання перехідних явищ у провідниках (розрахунок часової залежності сили струму через провідник)

Розглянемо задачу про моделювання перехідних процесів при включенні провідника в електричний ланцюг на прикладі розрахунку часової залежності сили струму через провідник, на кінцях якого підтримується постійна різниця потенціалів.

Фізична модель повинна визначити форму, розміри й матеріал провідника, форму, склад та розміри електричного контуру, а також фізичні процеси, що відбуваються в них і призводять до зміни електричного опору й сили струму з часом. Серед цих процесів перше місце займає виникнення електрорушійної сили (ЕРС) і струму самоіндукції під час подання електричної напруги. Іншим процесом, який може призвести до зміни електричного опору, є нагрівання провідника з часом, що буде викликати зміну його електричного опору, а також геометричних розмірів. Зміна температури провідника буде відбуватися до того моменту, поки кількість теплоти, що виділяється у провіднику за одиницю часу внаслідок проходження електричного струму, не стане рівною кількості теплоти, яка розсіюється провідником за одиницю часу внаслідок його теплообміну з навколишнім середовищем. Для деяких провідників у інтервалі між початковою температурою і стаціонарною, що встановлюється з часом, може знаходитися точка деякого фазового перетворення, яке призводить до стрибкоподібної зміни питомого електричного опору матеріалу провідника. Крім того, протікання електричного струму може викликати переміщення домішок і дефектів у провіднику, що призводитиме до перебудови його дефектної структури і зміни питомого електричного опору матеріалу. Дефектна структура може змінюватися також внаслідок "старіння" матеріалу. Останніми двома ефектами, звичайно, можна знехтувати, бо швидкість перебудови дефектної структури значно нижча за швидкість перехідних явищ, тому ефекти, що викликають ці групи процесів, як правило, будуть сильно рознесені в часі. Для спрощення моделі будемо також вважати, що під час протікання перехідних явищ у матеріалі провідника не відбувається фазових перетворень. Це припущення може бути обґрунтоване тим, що зазвичай як провідникові матеріали обирають речовини, які не мають фазових перетворень у робочому діапазоні температур.

Необхідність урахування зміни електричного опору і геометричних розмірів провідника внаслідок його нагрівання буде визначатися потрібною точністю одержуваного результату. Максимальна похибка, зумовлена нехтуванням цими ефектами, може бути оцінена так. Критерієм можливості нехтування температурною залежністю питомого електричного опору і геометричних розмірів провідника буде відмінність відношення $R_{ст}/R_0$ від одиниці. Тут індекс "0" відноситься до початкового стану провідника, а індекс "ст" – до стаціонарного.

Стаціонарне значення сили струму, що встановлюється після завершення перехідних процесів, буде визначатися законом Ома: $I_{ст} = U/R_{ст}$. Для циліндричного проводу температурна залежність електричного опору визначається співвідношенням

$$R_{ст} = R_0(1 + \alpha_R(T_{ст} - T_0)), \quad (ЛЗ.1)$$

де $\alpha_R = \alpha_p - \alpha_l$ – температурний коефіцієнт електричного опору, α_p – температурний коефіцієнт питомого електричного опору, α_l – температурний коефіцієнт лінійного розширення. При цьому величина електричного опору пов'язана з питомим електричним опором провідника та його геометричними розмірами співвідношенням

$$R = \frac{\rho l}{\pi r^2}, \quad (ЛЗ.2)$$

де ρ – питомий електричний опір, l – довжина провідника, r – його радіус.

Будемо вважати, що температурні залежності питомого електричного опору й довжини провідника лінійні, тобто коефіцієнти α_p і α_l є сталими. Для більшості провідників лінійні залежності в невеликих інтервалах температур виконуються достатньо точно. Якщо для матеріалу провідника, що розглядається, лінійні закони не виконуються, необхідно використовувати експериментальні дані про температурні залежності питомого електричного опору і довжини. Ці залежності можуть бути включені до математичної моделі процесу у вигляді інтерполяційних формул.

У цьому випадку стаціонарні значення питомого електричного опору й лінійних геометричних розмірів можуть бути розраховані інтегруванням:

$$\rho_{CT} = \rho_0 \left(1 + \int_{T_0}^{T_{CT}} \alpha_{\rho}(T) dT \right),$$

$$I_{CT} = I_0 \left(1 + \int_{T_0}^{T_{CT}} \alpha_1(T) dT \right), \quad (ЛЗ.3)$$

$$r_{CT} = r_0 \left(1 + \int_{T_0}^{T_{CT}} \alpha_1(T) dT \right).$$

Зробимо деякі оцінки. Зміна температури провідника при протіканні електричного струму може коливатися від декількох градусів у випадку використання провідника для передачі електричного струму до кількох сотень градусів у випадках його використання як нагрівального елемента. У першому випадку зазвичай використовують такі матеріали, як мідь, алюміній та інші, що мають малі значення питомого електричного опору. Для міді $\alpha_R = \alpha_{\rho} - \alpha_1 = (4,3 - 0,02) \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1} = 4,3 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Для алюмінію $\alpha_R = \alpha_{\rho} - \alpha_1 = (4,1 - 0,02) \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1} = 4,1 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Якщо різниця між початковою та стаціонарною температурами дорівнюватиме 10 К, відношення стаціонарного значення електричного опору до початкового становитиме приблизно 1,04 - 1,05. Зазвичай коливання параметрів провідника знаходяться у межах 5 - 10 % від номіналу, тому зміною електричного опору внаслідок нагрівання можна у цьому випадку знехтувати.

Типовими прикладами провідникових матеріалів, що використовують як нагрівальні елементи, є ніхром та вольфрам. Для ніхрому $\alpha_R = \alpha_{\rho} - \alpha_1 = (150 - 15) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1} = 1,4 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$. Для вольфраму $\alpha_R = \alpha_{\rho} - \alpha_1 = (5,0 - 0,004) \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1} = 5,0 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. При нагріванні на 1000 К відношення стаціонарного значення електричного опору до початкового становитиме приблизно 1,14 для ніхрому і 6,0 для вольфраму. У цьому разі, особливо для вольфраму, зміна електричного опору внаслідок нагрівання є суттєвою і повинна враховуватися при моделюванні.

Розглянемо вплив струму самоіндукції на перехідну характеристику.

У момент включення напруги у провіднику виникає ЕРС самоіндукції, яка, за законом Ленца, спрямована проти прикладеної напруги і сповільнює наростання струму в ланцюгу. Величина ЕРС самоіндукції

$$\varepsilon = -\frac{d\Phi}{dt} = -L \frac{dI}{dt}, \quad (ЛЗ.4)$$

де Φ – електричний потік, L – індуктивність провідника, яка визначається формою контуру, t – час. За законом Ома, з (ЛЗ.4) маємо

$$I = \frac{U - L \frac{dI}{dt}}{R} = \frac{U}{R_{ст}^*} - \frac{L}{R_{ст}^*} \frac{dI}{dt} = I_{ст}^* - \frac{L}{R_{ст}^*} \frac{dI}{dt}, \quad (ЛЗ.5)$$

де $R_{ст}^*$, $I_{ст}^*$ – деякі умовні значення електричного опору та сили струму. Для випадку, коли можна зневажати температурною залежністю електричного опору, вони будуть дорівнювати стаціонарним значенням $R_{ст}$ та $I_{ст}$, а рівняння (ЛЗ.5) буде мати розв'язок

$$I = I_{ст} \left(1 - e^{-\frac{R}{L}t} \right). \quad (ЛЗ.6)$$

У випадку, коли необхідно враховувати температурну залежність електричного опору провідника, рівняння (ЛЗ.5) можна перетворити до вигляду

$$\frac{dI}{dt} = \frac{U - R(t)I(t)}{L} \quad (ЛЗ.7)$$

і далі розв'язувати за допомогою обчислювальних методів.

Визначення температури, що встановиться у стаціонарному режимі протікання струму, не може бути зроблене строгими методами, оскільки невідомі умови тепловідводу від провідника. Проте теорія дає можливість виконати оцінювання максимального значення температури, яке може встановитися за умови, що теплообмін між провідником та повітрям здійснюється лише завдяки теплопровідності та випромінюванню. Якщо в теплообміні будуть брати участь також процеси конвекції та випромінювання, то кількість теплоти, що віддається провідником у навколишнє середовище, збільшиться і температура у стаціонарному режимі буде нижчою. Для оцінки стаціонарної температури необхідно розв'язати рівняння теплового балансу

$$Q_{\text{від}} = \int_t^{t+\Delta t} \frac{U^2}{R(t, T_{\text{пр}})} dt, \quad (\text{ЛЗ.8})$$

де $Q_{\text{від}}$ – кількість теплоти, що віддана провідником навколишньому середовищу за час Δt , $T_{\text{пр}}$ – температура провідника.

На рис. ЛЗ.1 наведено схематичний вигляд залежності сили струму у провіднику від часу для двох випадків.

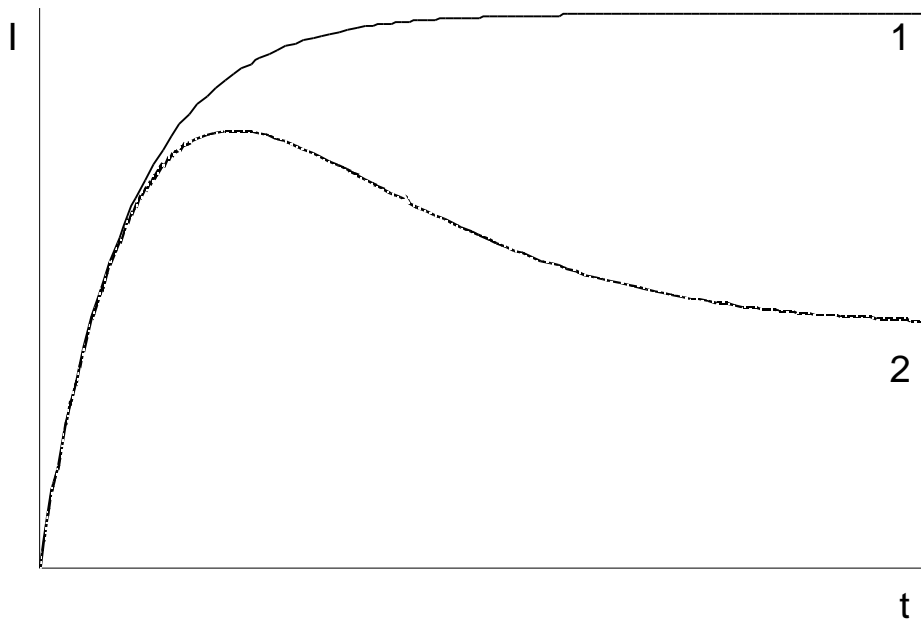


Рис. ЛЗ.1. Вигляд залежності сили струму у провіднику від часу:
 1 – враховується лише виникнення струму самоіндукції;
 2 – додатково враховуються нагрівання провідника й температурна залежність електричного опору

Перший випадок відповідає рівнянню (ЛЗ.6), тобто враховує лише виникнення струму самоіндукції. У другому випадку додатково враховані температурна залежність електричного опору провідника, яка була прийнята лінійною, а також зміна температури провідника внаслідок його нагрівання струмом і теплового випромінювання його поверхні. Такі умови можуть виконуватися, якщо провідник знаходиться у вакуумі, де процесами теплопровідності і конвекції можна знехтувати, або якщо перехідний процес проходить настільки швидко, що теплопровідність і конвекція не встигають вплинути на температуру провідника. У цьому разі можна прийняти:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{I(t)U - \sigma S(T - T_{\text{nc}})^4}{mc_p}, \quad (\text{ЛЗ.9})$$

де $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2\text{К}^4)$ – стала Стефана-Больцмана, m – маса провідника, S – площа його поверхні, c_p – питома теплоємність матеріалу провідника при постійному тиску, T_{nc} – температура навколишнього середовища. Тоді чисельна модель для аналізу часової залежності сили струму може бути записана в такому вигляді:

$$\left\{ \begin{array}{l} I_i = I_{i-1} + \Delta I_{i-1}, \\ T_i = T_{i-1} + \Delta T, \\ R_i = R_0(1 + \alpha_R(T_i - T_0)), \\ \Delta I_i = (U - R_i I_i) \Delta t / L, \\ \Delta T_i = (I_i U - \sigma S(T_i - T_{\text{nc}})^4) \Delta t / mc_p, \\ I_0 = I(0), \\ T_0 = T(0), \end{array} \right. \quad (\text{ЛЗ.10})$$

де Δt – шаг за часом, α_R – термічний коефіцієнт електричного опору провідника, $I(0)$ і $T(0)$ – сила струму й температура в початковий момент часу.

Контрольні запитання

1. Чому в електричних ланцюгах виникають перехідні явища?
2. Які фізичні ефекти можуть призводити до зміни величини електричного струму в провіднику при сталому значенні різниці потенціалів на його кінцях?
3. Як визначити фізичні ефекти, що необхідно враховувати при моделюванні перехідних явищ у електричному ланцюгу?
4. Дайте порівняльну характеристику методів підбору емпіричних формул. Які з цих методів можна використовувати для апроксимації температурних залежностей фізичних властивостей провідників?
5. Як залежить вигляд розв'язку рівняння (ЛЗ.7) від початкових умов і параметрів системи?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4

Моделювання температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника

Модель складу системи в даному випадку повинна задавати матеріал напівпровідника, основні домішки, що містяться в ньому, та їхні концентрації, а також типи і концентрації структурних дефектів. У більшості випадків для виготовлення напівпровідникових приладів та інтегрованих схем використовують монокристали кремнію, вирощені за методом Чохральського. Такі монокристали зазвичай містять одну легувальну домішку, яка є щільним донором або акцептором. Вони містять також кисень і вуглець, концентрації яких порівнянні з концентраціями легувального елемента, проте вони є електрично неактивними домішками. Нагрівання монокристалів призводить до розпаду твердого розчину кисню у кремнії. На першому етапі розпаду формуються кластери атомів кисню, що за електричними властивостями є щільними донорами. У деяких випадках кристали кремнію можуть містити інші щільні донорні та акцепторні домішки, які можуть істотно впливати на величину питомого електричного опору. Це важливо, наприклад, у сильно компенсованих і слабологованих кристалах.

В основі фізичної моделі, яка використовуватиметься для розрахунку питомого електричного опору, можуть бути покладені модель зонної структури напівпровідника, а також напівкласична теорія електропровідності. З останньої можна одержати такий вираз для величини питомого електричного опору:

$$\rho = \frac{1}{e(n\mu_n + p\mu_p)}, \quad (\text{Л4.1})$$

де e – заряд електрона, n – концентрація вільних електронів, μ_n – їх рухливість, p та μ_p – концентрація і рухливість дірок. Якщо виконуватимуться умови $n \gg p$, або $n \ll p$, то вираз (Л4.2) буде мати вигляд, відповідно,

$$\rho = \frac{1}{ne\mu_n} \quad \text{або} \quad \rho = \frac{1}{pe\mu_p}. \quad (\text{Л4.2})$$

Ці умови зазвичай виконуються при не досить високих температурах, якщо концентрації щільних донорів та акцепторів істотно розрізняються.

Таким чином, розрахунок температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника розпадається на дві задачі – розрахунок температурних залежностей концентрацій вільних носіїв заряду (електронів та дірок) і розрахунок температурної залежності рухливості носіїв заряду.

Рухливість електронів і дірок визначається, у першу чергу, декількома механізмами їх розсіювання в напівпровіднику. Основними механізмами є розсіювання на коливаннях кристалічної решітки (фононах), розсіювання на заряджених атомах домішок, розсіювання на нейтральних атомах домішок і розсіювання на структурних дефектах. На сьогодні не існує задовільної теорії розсіювання, яка б дала змогу виконувати кількісні розрахунки рухливості електронів і дірок. Основні проблеми виникають при врахуванні розсіювання на коливаннях решітки, яке зростає з підвищенням температури і є основним механізмом при температурах вище за 100 - 300 К. Проте існують експериментальні дані про температурну залежність рухливості носіїв заряду у високочистих монокристалах. У припущенні, що легувальні елементи і структурні дефекти не впливають на цей механізм розсіювання, наявні дані можна використовувати в моделі за допомогою апроксимуючих або інтерполяційних формул. Таке припущення у більшості випадків виконується достатньо точно завдяки малим концентраціям домішок і дефектів у монокристалічних напівпровідниках. Для кремнію при $T = 150 - 400$ К у першому наближенні можна використовувати такі емпіричні залежності рухливості електронів та дірок від температури при розсіюванні на коливаннях решітки:

$$\mu_n = 2,1 \cdot 10^5 T^{-2,5}; \quad \mu_p = 2,3 \cdot 10^5 T^{-2,7}. \quad (Л4.3)$$

Суттєві труднощі виникають також при моделюванні температурної залежності розсіювання електронів та дірок на структурних дефектах. Вони зумовлені, насамперед, можливістю перебудови (у тому числі необоротної) дефектної структури кристала при зміні температури, а також зміною складу й міцності домішкових атмосфер, що формуються на дефектах і визначають розподіл електричного заряду та спотворення кристалічної решітки навколо дефектів. Проте у багатьох випадках можна вважати, що концентрації структурних дефектів малі і вони не впливають істотно на рухливість носіїв заряду.

Розсіювання електронів та дірок на іонах домішок зменшується з ростом температури. Тому воно є суттєвим і може бути визначальним при низьких температурах. При розрахунку розсіювання на іонах можна вважати, що центри розсіювання є закріпленими іонами, які мають заряд Ze і хаотично розподілені по кристалу, а потенціал утворюваного іоном елект-

ричного поля внаслідок екранування іона вільними носіями відрізняється від кулонівського і має вигляд

$$V(r) = -\frac{Ze}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{L_D}\right), \quad (\text{Л4.4})$$

де ϵ – діелектрична проникність напівпровідника, L_D – дебаєвська довжина екранування. У випадку, коли розглядається область домішкової провідності в напівпровіднику, в якому переважає один тип донорної домішки, дебаєвська довжина екранування дорівнює

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{ne^2}}. \quad (\text{Л4.5})$$

Потенціал (Л4.4) називають потенціалом Юкави. Якщо розсіювання носіїв заряду є пружним, то рухливість, зумовлена їх розсіюванням на іонах, буде визначатися виразом:

$$\mu = \frac{2^{7/2} (4\pi\epsilon\epsilon_0)^2 (kT)^{3/2}}{\pi^{3/2} Z^2 e^3 \sqrt{m^*} N_I \left[\ln(1 + \beta^2) - \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \right]}, \quad (\text{Л4.6})$$

де m^* – ефективна маса густини станів для носіїв заряду, N_I – концентрація іонів,

$$\beta = L_D \sqrt{\frac{24m^* kT}{\hbar^2}}. \quad (\text{Л4.7})$$

Ефективні маси густини станів носіїв заряду у кремнії становлять $1,05m_e$ і $0,56m_e$ для електронів та дірок відповідно. У практиці для оцінки впливу розсіювання на іонах часто використовують експериментальні дані про температурні залежності рухливості вільних електронів і дірок. Такі дані можуть бути введені до моделі і враховані за допомогою інтерполяційних формул або апроксимуючих функцій. Для кремнію можна використовувати таку емпіричну залежність рухливості від температури при розсіюванні на іонах:

$$\mu_{n(p)} = \frac{4,7 \cdot 10^{19} (m_{n(p)}^* / m_e)^{1/2} T^{3/2}}{N_I \ln(1 + 4,5 \cdot 10^{12} T^2 N_I^{-2/3})} . \quad (Л4.8)$$

Розсіюванням електронів та дірок на нейтральних атомах домішок зазвичай можна знехтувати завдяки відносно малим концентраціям домішок і їх слабким порівняно із зарядженими домішками і фононами впливом на рух носіїв заряду.

У випадку, коли необхідно враховувати одночасну дію декількох механізмів розсіювання носіїв заряду, рухливість можна розрахувати за формулою

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} . \quad (Л4.9)$$

Для розрахунку концентрацій вільних носіїв заряду, заряджених та нейтральних домішок і точкових дефектів необхідно розв'язати рівняння електронейтральності:

$$n + \sum_i q_i N_{A_i}^- = p + \sum_j q_j N_{D_j}^+ , \quad (Л4.10)$$

де $N_{A_i}^-$, $N_{D_j}^+$ – концентрації заряджених іонів акцепторних та донорних домішок, відповідно, і-го та j-го типів, q_i , q_j – їх заряди, виражені в одиницях заряду електрона. У більшості випадків у напівпровіднику переважає одна з електрично активних легувальних домішок. Якщо, наприклад, це буде щільна донорна домішка, тоді рівняння (Л4.10) набуде вигляду:

$$n = p + N_D^+ . \quad (Л4.11)$$

При розрахунку концентрацій заряджених частинок у напівпровіднику зазвичай припускають, що всі валентні електрони мають енергію, яка відповідає стелі валентної зони, а всі вільні електрони мають енергії, що відповідають дну зони провідності. Також вважають, що розподіл електронів між цими двома станами у невироджених напівпровідниках визначається статистикою Фермі, а густини станів електронів у зоні провідності (N_C) і дірок у валентній зоні (N_V) зростають з підвищенням температури і визначаються виразами:

$$N_c = \frac{2(2\pi m_n^* kT)^{3/2} M_C}{h^3}; \quad N_v = \frac{2(2\pi m_p^* kT)^{3/2}}{h^3}, \quad (Л4.12)$$

де M_C – число еквівалентних мінімумів потенційної енергії в зоні провідності. Для кремнію ця величина дорівнює 6, для германію – 8, для арсеніду галію – 1.

За цими припущеннями, для концентрацій вільних електронів, дірок і заряджених іонів можна одержати такі вирази:

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_c \exp\left[\frac{E_F - E_C}{kT}\right]; \\ p = N_v \exp\left[\frac{E_V - E_F}{kT}\right]; \\ N_D^+ = N_D \left\{ 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp\left[\frac{E_F - E_D}{kT}\right]} \right\}; \\ N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A \exp\left[\frac{E_A - E_F}{kT}\right]}, \end{array} \right. \quad (Л4.13)$$

де E_F – рівень Фермі, E_C і E_V – енергетичні рівні, що відповідають стелі валентної зони та дну зони провідності, E_D та E_A – локальні енергетичні рівні, що їх утворюють донорні та акцепторні домішки у забороненій зоні напівпровідника, g_A і g_D – кратності виродження рівнів, що дорівнюють 4 і 2 відповідно для щільних акцепторів та донорів, N_D та N_A – повні концентрації атомів донорної та акцепторної домішок (нейтральних і заряджених). Ці концентрації визначаються умовами виготовлення напівпровідника і при розрахунку повинні бути заданими. Між енергіями стелі валентної зони та дна зони провідності існує співвідношення: $E_C - E_V = E_g$, де E_g – ширина забороненої зони, яка є однією з основних характеристик напівпровідника. Для основних напівпровідників її величина становить:

$$\text{Si: } E_g = 1,170 - \frac{4,73 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 636} \text{ eV}; \quad (Л4.14)$$

$$\text{Ge: } E_g = 0,7437 - \frac{4,774 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 235} \text{ eV}; \quad (Л4.15)$$

$$\text{GaAs: } E_g = 1,519 - \frac{5,405 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 204} \text{ eV}. \quad (Л4.16)$$

При розрахунках початок відліку енергії може бути обраним довільно. Зазвичай обирають $E_C = 0$ або $E_V = 0$. Відповідно одержують $E_V = -E_g$ або $E_C = E_g$. Таким чином, за наявності n типів заряджених домішок і дефектів система (Л4.13) разом з рівнянням електронейтральності (Л4.10) є системою $n + 3$ рівнянь з $n + 3$ невідомими. Підстановкою рівнянь системи (Л4.13) у рівняння електронейтральності вона зводиться до одного трансцендентного рівняння, у якому невідомою величиною буде рівень Фермі. Це рівняння може бути розв'язане обчислювальними методами, наприклад методом ділення навпіл. Після знаходження рівня Фермі з системи рівнянь (Л4.10), (Л4.13) можна розрахувати концентрації вільних носіїв струму, а також концентрації іонів домішок. Слід відмітити, що система (Л4.13) буде справедливою лише у випадку щільних домішок та акцепторів III та V груп, а також для інших домішок і дефектів, які можуть утворювати в забороненій зоні лише один донорний або акцепторний рівень. Зазвичай саме такі домішки використовують для легування напівпровідникових кристалів. На рис. Л4.1 наведено схематичний вигляд температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника, що містить електрично активну домішку одного типу. Криві 1 і 2 розрізняються концентрацією домішки ($N_2 > N_1$). Криві 1 і 3 розрізняються енергією іонізації домішки ($E_2 > E_1$).

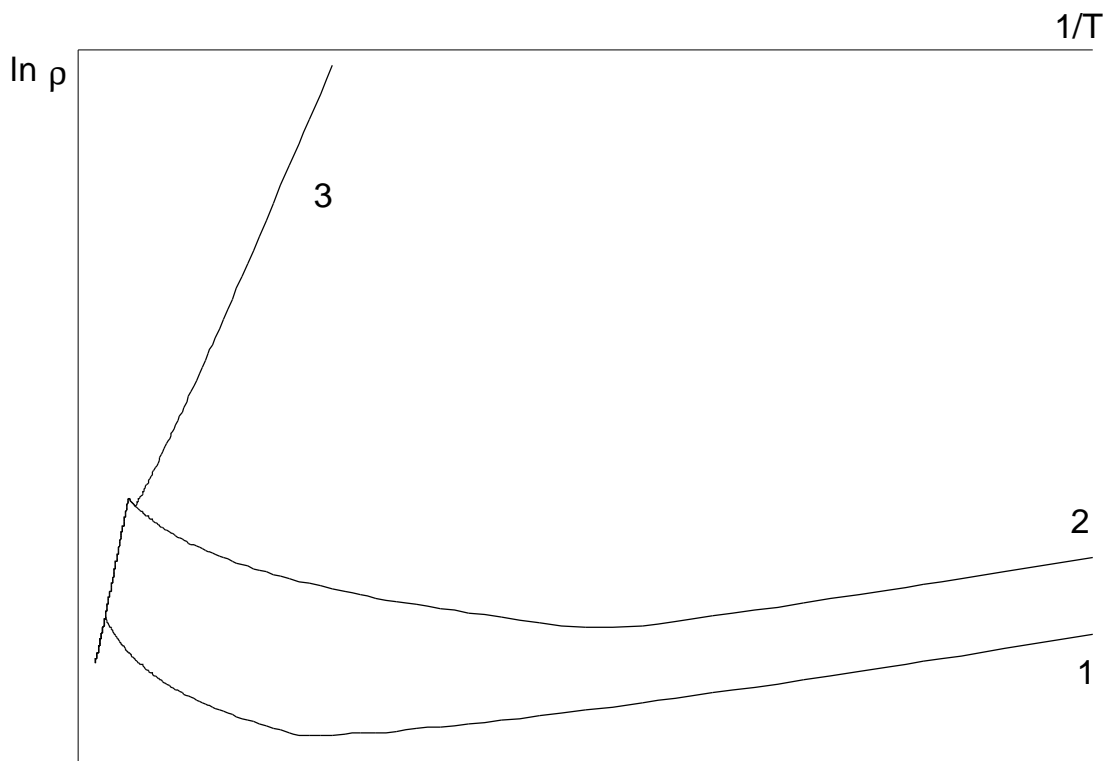


Рис. Л4.1. Схематичний вигляд температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника, що містить легуючу донорну домішку

Контрольні запитання.

1. Чим визначається температурна залежність питомого електричного опору провідника?
2. Чому температурна залежність питомого електричного опору напівпровідника є немонотонною?
3. Від чого залежить вигляд температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника?
4. Які фактори необхідно враховувати при моделюванні температурної залежності рухливості носіїв струму в напівпровіднику?
5. Які фактори необхідно враховувати при моделюванні температурної залежності рівноважних концентрацій носіїв струму в напівпровіднику?
6. Дати порівняльну характеристику методів розв'язування трансцендентних алгебраїчних рівнянь. Які з цих методів можна використовувати при розв'язування рівняння електронейтральності (Л4.10)?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 5

Моделювання згасаючих коливань

Моделювання згасаючих коливань можна виконувати на прикладах різноманітних фізичних систем, зокрема на прикладі математичного, фізичного і пружинного маятників, електричного коливального контуру тощо. Розглянемо фізичні моделі деяких систем, у яких можливе спостереження згасаючих коливань.

Математичний маятник. Фізичною моделлю математичного маятника є масивне тіло з нульовими розмірами (матеріальна точка), підвішене на невагомій нерозтяжній нитці. Рівноважним положенням маятника є таке, при якому він розташований вертикально. Якщо маятник відхилити від рівноважного положення, виникає сила, що прагне повернути його назад. Але в момент повернення до рівноваги маятник має деяку кінетичну енергію. Тому він продовжує рухатися далі, доки остання не зменшиться до нуля. При цьому він буде відхиленням від рівноваги у бік, протилежний його початковому відхиленню, і на нього знов діє повертальна сила, що прагне повернути його до рівноважного стану. Тому виникають коливання маятника навколо положення рівноваги.

Джерелом можливих помилок у цій моделі буває нехтування скінченними розмірами тіла та масою підвісу. Умовами придатності моделі можуть бути малі геометричні розміри тіла порівняно з довжиною підвісу, а також мала маса підвісу порівняно з масою тіла. У випадку, коли відповідні похибки стають істотними, необхідно перейти від моделі математичного маятника до моделі фізичного маятника. Ще одним джерелом помилок є нехтування деформацією підвісу під час коливань. Відповідна помилка стає суттєвою, коли деформацію неможливо вважати малою порівняно з довжиною підвісу. У багатьох випадках деформацію можна приймати пружною і скорегувати модель шляхом накладання пружних коливань, вважаючи, що різні типи коливань відбуваються незалежно один від одного. Згасання коливань буде зумовлене, у першу чергу, силою опору повітря, а також тертям у точці закріплення підвісу.

Пружинний маятник. Фізичною моделлю пружинного маятника є матеріальна точка, підвішена на невагомій абсолютно пружній пружині. Рівноважним положенням маятника є таке, при якому сила тяжіння, що діє на тіло, дорівнює силі пружності за величиною і протилежна їй за напрямком. У цьому випадку при відхиленні від рівноваги також виникає повертальна сила (рівнодіюча сил тяжіння та пружності), що прагне повернути тіло до рівноважного стану і призводить до виникнення коливань. Основними джерелами помилок при моделюванні є скінченні геометричні

розміри тіла, наявність у пружини маси і непружні деформації пружини. Ці помилки будуть незначними, якщо розміри тіла малі порівняно з довжиною пружини, маса пружини мала порівняно з масою тіла, а непружні деформації малі порівняно з пружними. Згасання коливань пов'язане, у першу чергу, з опором повітря і внутрішнім тертям пружини (внутрішніми процесами в матеріалі пружини).

Фізичний маятник. Моделлю фізичного маятника є абсолютно тверде тіло, що може вільно (без тертя) коливатися відносно вісі, яка проходить крізь це тіло. Рівноважним положенням фізичного маятника є таке, при якому найкоротша лінія, що з'єднує вісь коливань з центром мас маятника, розташована вертикально. При відхиленні від рівноваги виникає момент сил, що прагне повернути тіло до рівноважного стану і викликає коливання маятника. Основними джерелами помилок даної моделі є нехтування деформаціями, що виникають у тілі під час його коливань. Ці помилки будуть незначними, якщо будуть малими відносні деформації маятника під час коливань. Згасання коливань зумовлене, головним чином, опором повітря й тертям.

Колівальний контур. Найпростішою моделлю електричного колівального контуру є послідовно з'єднані електричні ємність (конденсатор) та індуктивність (катушка). У цьому випадку рівноважним є такий стан, при якому заряд на ємності дорівнює нулю. При появі на ємності заряду виникає електричне поле, яке прагне його зменшити. У момент, коли цей заряд стає рівним нулю, через контур протікає електричний струм, який призводить до повторного зарядження конденсатора з протилежною полярністю і виникнення поля, що послаблює струм. Коли струм зникає, конденсатор знов є зарядженим і знаходиться під впливом поля, що прагне зменшити його заряд. Таким чином, у колівальному контурі виникають коливання електричного заряду й напруги на конденсаторі, а також сили струму. Модель коливань передбачає відсутність будь-яких електричних полів, крім того, що створюється зарядом ємності, квазістаціонарність струму в контурі (тобто рівність сили струму в усіх точках контуру для будь-якого моменту часу), а також ідеальність ємності, індуктивності, проводів та з'єднань елементів (тобто відсутність у ємності індуктивного і активного електричного опору, в індуктивності – ємнісного та активного опору, у проводів – ємнісного та індуктивного опору, у з'єднань – будь-якого опору). Припущення щодо квазістаціонарності струму виконується тим краще, чим нижча частота коливань у контурі. Згасання коливань зумовлене наявністю активного опору проводів та інших елементів контуру.

Найпростіша загальна математична модель згасаючих коливань має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{d^2\xi}{dt^2} + \alpha \frac{d\xi}{dt} + \omega^2\xi = 0; \\ \xi(0) = \xi_0; \\ \left. \frac{d\xi}{dt} \right|_{t=0} = \psi_0, \end{cases} \quad (Л5.1)$$

де ξ – параметр, який визначає відхилення системи від рівноважного положення, ω – частота коливань, t – час, α – коефіцієнт. Другий доданок формули враховує втрати енергії коливань, тобто тертя при механічних коливаннях і наявність активного опору при електричних. Якщо $\alpha = 0$, то ми одержуємо модель гармонічного осцилятора, тобто системи, у якій відбуваються незгасаючі гармонічні коливання. У цьому разі:

$$\begin{aligned} \xi(t) &= A \sin(\omega t + \varphi_0), \\ \xi(0) &= A \sin \varphi_0, \\ \left. \frac{d\xi}{dt} \right|_{t=0} &= A\omega \cos \varphi_0, \end{aligned} \quad (Л5.2)$$

де A – амплітуда коливань, φ_0 – їх початкова фаза. Більш складні математичні моделі коливань можуть враховувати ангармонізм коливань. У такому випадку вони містять доданки зі степенями параметра ξ та його похідної, відмінними від першої. Крім того, у математичних моделях згасаючих коливань шляхом введення відповідних залежностей коефіцієнта α та частоти коливань ω може враховуватись зміна параметрів системи з часом.

Для математичного й фізичного маятників параметром ξ найбільш зручно обрати кут γ відхилення вісі маятника від вертикалі. Якщо коливання відбуваються біля поверхні Землі і спостерігаються в інерційній системі відліку, момент сил (відносно вісі обертання), що повертають маятник у рівноважне положення, буде рівним $M = -mgl \sin \gamma$, де m – маса маятника, g – прискорення вільного падіння, l – довжина підвісу для математичного маятника чи відстань між центром мас та віссю обертання для фізичного. Згідно з основним рівнянням динаміки обертового руху твердого тіла за відсутності тертя, можна записати:

$$M = I \frac{d^2\gamma}{dt^2} \quad \text{або} \quad \frac{d^2\gamma}{dt^2} + \frac{mgl}{I} \sin \gamma = 0, \quad (Л5.3)$$

де I – момент інерції маятника відносно вісі його обертання. При малих γ можна прийняти $\sin \gamma \approx \gamma$, і ми одержимо рівняння незгасаючих гармонічних коливань. У випадку, якщо коливання відбуваються на висоті h над

поверхнею Землі, момент сил буде дорівнювати $M = G \frac{mM_E}{(R_E + h)^2} l \sin \gamma$, де G

– гравітаційна стала, M_E та R_E – відповідно маса і радіус Землі. У більш загальному випадку, коли на тіло діють декілька сил, цей момент буде рівним $M = \sum_i F_{i\perp} l$, де $F_{i\perp}$ – проекція i -ї сили на напрямок, у якому розташова-

ний підвіс. При коливаннях, що розглядаються в неінерційних системах відліку, необхідно додатково враховувати момент сил інерції відносно вісі коливань. У загальному випадку сили інерції складаються з поступової сили інерції $\mathbf{F}_{ir} = -m\mathbf{a}$, відцентрової сили інерції $\mathbf{F}_c = m(\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}))$, коріолісової сили інерції $\mathbf{F}_K = 2m(\mathbf{v}_{rel} \times \boldsymbol{\omega})$ і додаткової сили інерції, що обумовлена нерівномірністю обертання неінерційної системи відліку

$\mathbf{F}_{ir} = -m \left(\frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} \times \mathbf{r} \right)$. Тут \mathbf{a} – прискорення неінерційної системи відносно інерційної, $\boldsymbol{\omega}$ – кутова швидкість обертального руху неінерційної системи, \mathbf{v}_{rel} – швидкість руху маятника відносно неінерційної системи.

Якщо в системі є тертя, то необхідно врахувати момент сил тертя. Не існує єдиної математичної моделі, яка б описувала тертя, оскільки воно зумовлене сукупністю багатьох різноманітних процесів розсіювання енергії. Якщо основні механізми розсіювання енергії відомі, то для конкретної системи може бути одержаний відповідний математичний опис сил тертя. У загальному випадку сила тертя може бути записана у вигляді поліноміального ряду, коефіцієнти якого визначаються експериментально. Практика свідчить, що, як правило, при малих швидкостях (кутових швидкостях) руху сила тертя пропорційна швидкості, а при великих значеннях швидкості – її квадрату. Тому відповідний доданок у рівнянні коливань (Л5.1) буде мати

вигляд $\alpha \frac{d\xi}{dt}$ або $\alpha' \left(\frac{d\xi}{dt} \right)^2$.

Для опису залежності коефіцієнтів α , α' і частоти коливань від часу також не існує єдиної математичної або фізичної моделі. Наприклад, частота коливань математичного маятника буде визначатися характером залежностей його маси, довжини й моменту інерції від часу, а також часом релаксації. Ці залежності, у свою чергу, будуть визначатися матеріалом маятника, зовнішнім середовищем та умовами коливань.

Коливання пружинного маятника в найпростішому випадку викликаються сумісною дією сил тяжіння та пружності на вантаж. Якщо коливання спостерігаються біля поверхні Землі, то сила тяжіння буде дорівнювати mg , а сила пружності дорівнюватиме $-k(\Delta x + \Delta x_0)$, де k – жорсткість пружини, Δx – відхилення маятника від рівноважного положення, а Δx_0 – рівноважна деформація пружини, що відповідає умові $mg = -k\Delta x_0$. Якщо

прийняти за початок відліку координати положення точки рівноваги, рівняння коливань маятника, записане для інерційної системи відліку, за відсутності тертя матиме вигляд

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{k}{m} x = 0. \quad (\text{Л5.4})$$

Враховувати наявність інших сил, віддаленість тіла від поверхні Землі або неінерційність системи відліку можна так само, як і у випадку математичного маятника. Співвідношення між силою тертя та швидкістю руху маятника в даному випадку може виявитися більш складним. Для деяких механізмів розсіювання енергії у твердих тілах величина внутрішнього тертя різко зростає біля окремих значень частоти коливань. Це призведе до неоднозначності залежності сили тертя від швидкості та суттєвого ускладнення задачі.

Для коливального контуру параметром ξ є електричний заряд конденсатора Q . Різниця потенціалів між обкладинками конденсатора дорівнює Q/C , де C – електрична ємність конденсатора. Це впливає з визначення електричної ємності. Електрична рушійна сила самоіндукції, що виникає внаслідок зарядження або розрядження конденсатора, становить

$$-L \frac{dI}{dt} = -L \frac{d^2 Q}{dt^2}, \text{ де } L \text{ – індуктивність, } I \text{ – сила струму. За відсутності зовнішньої напруги й активного опору одержуємо таку математичну модель коливального контуру:}$$

нішньої напруги й активного опору одержуємо таку математичну модель коливального контуру:

$$\begin{cases} L \frac{d^2 Q}{dt^2} + \frac{Q}{C} = 0, \\ Q(0) = Q_0, \\ I(0) = I_0. \end{cases} \quad (\text{Л5.5})$$

За наявності активного опору необхідно врахувати падіння напруги на цьому опорі. Тоді модель (Л5.1) набуде вигляду:

$$\begin{cases} L \frac{d^2 Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{Q}{C} = 0, \\ Q(0) = Q_0, \\ I(0) = I_0. \end{cases} \quad (\text{Л5.6})$$

Вигляд розв'язку моделі, тобто залежність $\xi(t)$, суттєво залежить від величини згасання. У випадку слабого згасання, якому відповідає умова $\omega_0 \tau \gg 1$ ($\tau = 1/\alpha$; ω_0 – власна частота коливань осцилятора, що не згасає), розв'язок має вигляд:

$$x \approx x_0 \exp\left[-\frac{t}{2\tau}\right] \sin(\omega_0 t). \quad (\text{Л5.7})$$

Залежність амплітуди коливань від часу для цього випадку наведено на рис. Л5.1 (крива а).

У випадку сильного згасання, тобто якщо умова $\omega_0 \tau \gg 1$ не виконується, вигляд розв'язку залежить від початкових умов. Зокрема, він може бути таким, як наведено на рис. Л5.1 (крива б).

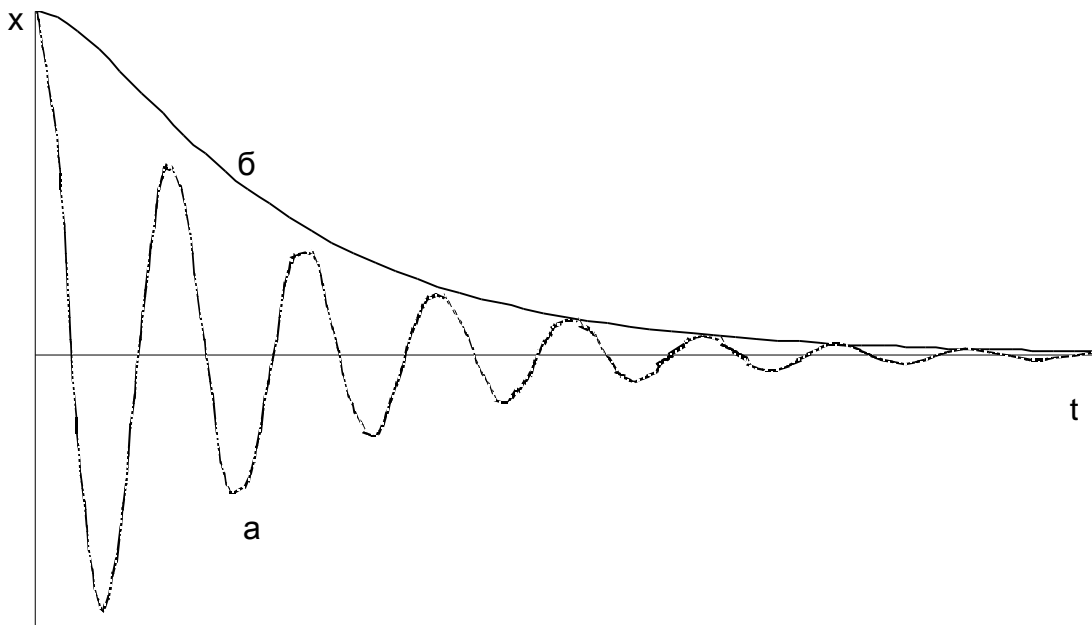


Рис. Л5.1. Залежність амплітуди коливань від часу для різних ступенів згасання

Контрольні запитання

1. Записати рівняння коливань для гармонічного осцилятора, рівняння згасаючих коливань, рівняння змушених коливань. Пояснити їх фізичний зміст.
2. Навести приклади систем, у яких можливі гармонічні коливання.
3. Які фізичні ефекти необхідно враховувати при побудові математичної моделі коливального контуру?
4. Як враховується дисипація (розсіяння) енергії в рівнянні коливань?
5. Як залежить вигляд розв'язку рівняння коливань від початкових умов і параметрів коливального контуру?
6. Які обчислювальні методи доцільно використовувати для розв'язування рівняння коливань?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 6

Побудова випадкових послідовностей

Завданням цієї роботи є побудова й дослідження випадкових послідовностей. Типове завдання роботи передбачає розробку алгоритму й побудову рівномірної послідовності псевдовипадкових чисел, перевірку якості одержаної послідовності, генерування послідовності із заданим законом розподілу, а також вивчення вбудованих функцій побудови випадкових послідовностей в одному з типових пакетів, що використовуються в математичному моделюванні (MS Excel, MathCad, MathLab тощо).

Загальний алгоритм побудови рівномірної послідовності псевдовипадкових чисел описаний у розділі 2. Розглянемо його реалізацію при використанні табличного процесора MS Excel пакета MS Office 2000. Кількість m розрядів у пам'яті ЕОМ дорівнює 32. Максимальне p , для якого виконується нерівність $5^{2p+1} < 2^m$, дорівнює 6. Тому обираємо: $\xi_0 = 2^{-m} = 2^{-32}$, $\xi_n = \{5^{2p+1} \xi_{n-1}\} = \{5^{13} \xi_{n-1}\}$. При такому виборі щонайменше серед перших 60000 елементів послідовності не буде однакових чисел. Перевіримо виконання деяких властивостей випадкових послідовностей для одержаного набору.

По-перше, необхідно перевірити моменти розподілу. Наведені нижче дані стосуються перших 10000 елементів отриманої послідовності. Серед-

нє значення елементів $m_\xi = \sum_{i=1}^N \xi_i = 0,4988$. Вибіркове стандартне відхилен-

ня $s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i^2 - m_\xi^2 = 0,08335$. Ці значення в пакеті MS Excel можна одер-

жати двома шляхами. У першому випадку необхідно використовувати вбудовані формули. Для цього необхідно вибрати комірку, в яку буде зроблений запис результату. Після цього обирають необхідну функцію, задають її параметри й натискають клавішу "Enter". Для обрання функції необхідно увійти в меню "Вставка", потім "Функції", далі "Статистичні". Для розрахунку середнього значення вибирають функцію "СРЗНАЧ", для якої необхідно задати посилання на комірки, у яких записані елементи послідовності. Оскільки число елементів є великим, посилання здійснюють так: у комірці "Число 1" роблять запис "Номер комірки, де записаний перший елемент:номер комірки, де записаний останній елемент", наприклад, "B3:B10002". Для розрахунку стандартного відхилення вибирають функцію "ДИСП". Посилання на комірки із записом елементів послідовності здійснюється так само, як і в попередньому випадку.

Інший шлях передбачає використання пакета статистичного аналізу. У цьому випадку необхідно вибрати в меню "Сервіс", потім "Аналіз даних", далі "Описова статистика". Після цього необхідно заповнити такі комірки діалогового вікна. У комірці "Вхідний інтервал" робиться посилання на комірки робочого аркуша, де містяться елементи отриманої послідовності. Посилання здійснюється так само, як і в попередніх випадках. Далі необхідно в пункті "Групування" позначити, знаходяться вихідні дані у рядках чи у стовпцях. Якщо перший рядок вхідного діапазону містить назви стовпців або ж перший стовпець містить назви рядків, це необхідно відмітити позначкою в пункті "Мітки у першому рядку". Після цього необхідно зазначити місце виведення результатів. Їх можна виводити на той самий робочий аркуш. Тоді в діалоговому вікні треба зробити позначку "Вихідний інтервал" та вказати координати лівої верхньої комірки вихідного діапазону. Дані можна також виводити на новий робочий аркуш або в нову робочу книгу. Для виведення необхідних даних треба також зробити в діалоговому вікні позначку "Вихідна статистика". У таблиці Лб.1 наведені результати аналізу перших 10000 елементів послідовності, отриманої методом, що був описаний вище.

Таблиця Лб.1

Вікно виведення результатів описової статистики MS Excel

Середнє	0,498838464
Стандартна помилка	0,002887119
Медіана	0,49809289
Мода	#Н/Д
Стандартне відхилення	0,288711854
Дисперсія вибірки	0,083354534
Ексцес	-1,207234155
Асиметричність	0,005318556
Інтервал	0,999992132
Мінімум	2,32831E-10
Максимум	0,999992132
Сума	4988,384643
Рахунок	10000

З наведених даних видно, що, по-перше, результати, отримані двома методами, збігаються (дисперсія вибірки описової статистики відповідає квадрату стандартного відхилення), по-друге, вони є досить близькими до значень, властивих рівномірним випадковим послідовностям, що задані на відрізку $[0, 1]$: математичне сподівання $m_{\xi} = 0,5$, дисперсія $\sigma^2 = 1/12 = 0,8(3)$, асиметрія $\mu_3 = 0$, коефіцієнт ексцесу $\gamma_2 = -1,2$, мінімальне та максимальне значення елементів вибірки, відповідно, 0 та 1. Проте для ґрунтовного висновку про відповідність моментів заданому типу розподі-

лу необхідне застосування статистичних критеріїв. Для перевірки гіпотези про характер розподілу доцільно використовувати критерій

У загальному випадку математичне формулювання задачі є таким: для заданої вибірки $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ випадкової величини X треба перевірити гіпотезу, чи є функція $f(x)$ щільністю ймовірності для X . Перевірку розпочинають з визначення мінімального та максимального значень випадкової величини X . Потім розбивають відрізок $[x_{\min}, x_{\max}]$ на n частин та визначають частоту попадання до них елементів послідовності. Відрізки розбиття можуть бути рівними чи нерівними. У практиці частіше використовують перший спосіб завдяки зручності подальших розрахунків. Нерівні відрізки розбиття використовують у випадках, коли треба врахувати наявні гіпотези про особливості закону розподілу.

Задача обрання кількості відрізків розбиття є нетривіальною. Теоретично показано, що завжди існує оптимальне число n^* відрізків розбиття, яке дозволяє для заданих форми закону розподілу та об'єму вибірки забезпечити максимальне наближення східчастої гістограми до неперервної кривої щільності розподілу генеральної сукупності. На рівні якісного аналізу існування оптимальної кількості відрізків розбиття можна пояснити тим, що за малої їх кількості гістограма має велику східчастість, тому будуть втрачені характерні особливості емпіричного розподілу. Зокрема, якщо інтервал розбиття взяти рівним розмаху емпіричних даних, то для будь-якого набору емпіричних даних ми одержимо рівномірний закон розподілу. Якщо ж ми виділимо три рівних інтервали, то будь-який дзвоноподібний розподіл буде зведений до трикутного. З іншого боку, за надмірно великої кількості відрізків розбиття, для багатьох з них частоти попадань будуть нульовими, а для інших відрізків – малими. Це також призведе до втрати інформації про характерні особливості розподілу. Ще одним наслідком буде суттєве збільшення похибки результатів, зумовлене тим, що відносна похибка визначення частот попадань буде тим більшою, чим менша ця частота.

Втім, у практиці рідко розв'язують задачу про знаходження оптимальної кількості відрізків розбиття, а частіше використовують емпіричні чи напівемпіричні формули. Зазвичай вважають, що близьким до оптимального є максимальне значення n^* , за якого гістограма ще залишається плавною. Іноді рекомендують вибирати такий розмір відрізків розбиття, щоб найменший стовпець гістограми містив не менше 10 спостережень (для крайніх стовпців – не менше 5 спостережень). Крім того, більшість фахівців рекомендують вибирати кількість відрізків розбиття непарною в межах 6-20. Деякі автори рекомендують більш жорстке обмеження – 10-15 відрізків.

З теоретичної точки зору оптимальна кількість відрізків розбиття залежить від обсягу вибірки N та ексцесу розподілу ϵ . Вона може бути визначена за формулами І.У. Алексєєвої

$$(Л6.1)$$

Зазвичай ексцес розподілу є невідомим, тому для практичних розрахунків рекомендують обирати значення коефіцієнта η в межах $0,55 - 1,25$, що відповідає найбільш поширеним законам розподілу. Зокрема, граничні значення відповідають рівномірному розподілу ($\epsilon = 1,8$) та розподілу Лапласа ($\epsilon = 6$).

При невідомих параметрах теоретичної функції розподілу критерієм відповідності отриманих емпіричних даних обраної теоретичної моделі зазвичай обирають критерій Пірсона

$$(Л6.2)$$

де v_i – експериментальна частота попадань значень X до i -го відрізка, p_i – теоретична ймовірність того, що значення X попаде до i -го відрізка, n – кількість відрізків розбиття, N – загальна кількість спостережень.

Параметри теоретичного розподілу, що необхідні для визначення теоретичних частот, можуть бути заданими або розрахованими за емпіричною функцією розподілу.

Для перевірки гіпотези отримане значення порівнюють з табличною величиною $\chi_{1-\alpha}^2$ для заданих рівня значущості α і числа степенів вільності. Рівнем значущості у даному випадку є ймовірність відкинути правильну гіпотезу. Його вибір залежить від завдань дослідження, кількості й точності вихідних даних. Зазвичай його обирають у межах $0,01-0,05$. Число степенів вільності обирають рівним $n - r - 1$, де r – число параметрів теоретичного закону розподілу, що визначають за емпіричною вибіркою. Зокрема, для рівномірного розподілу $r = 0$, для біноміального – $r = 1$, для нормального – $r = 2$. Якщо $\chi^2 > \chi_{1-\alpha}^2$, то гіпотезу відкидають. У протилежному випадку вона приймається.

Перевірку гіпотези можна здійснити також за допомогою вбудованих функцій пакета MS Excel. Для перевірки треба підготувати набори даних з теоретичними та емпіричними частотами попадань результатів до заданих відрізків розбиття. Після цього задають комірку для виведення результатів і обирають у меню "Вставка", "Функція", "Статистичні", "CHI2ТЕСТ". Потім у комірку "Фактичний інтервал" діалогового вікна

вводять дані про індекси комірок робочого аркуша, у яких містяться набори емпіричних частот попадань, а в комірку "Очікуваний інтервал" діалогового вікна – про індекси комірок робочого аркуша, у яких містяться набори теоретичних частот. Обидва інтервали мають містити однакові кількості точок даних. Результатом, що записується у вихідну комірку робочого аркуша, є значення ймовірності того, що гіпотеза про функцію розподілу є помилковою.

Для перших 10000 елементів псевдовипадкової послідовності, одержаної за описаним вище алгоритмом, χ^2 тест дає такі результати. Оптимальне число відрізків розбиття . Обираємо число відрізків розбиття рівним найближчому до n^* цілому числу⁴, тобто $n = 22$.

Довжина відрізка розбиття дорівнюватиме . У таблиці Л6.2

наведено вихідні дані про фактичні та теоретичні частоти попадань елементів псевдовипадкової послідовності до визначених відрізків розбиття.

Розраховане за цими даними значення критерію χ^2 дорівнює 0,534. Тобто ймовірність того, що отримана псевдовипадкова послідовність є рівномірною, становить 53,4 %. Це суттєво перевищує значення 1 – 5 %, які зазвичай обирають як рівень значущості. Тому ми маємо вважати, що гіпотеза про рівномірний розподіл отриманої послідовності на відрізок $[0, 1]$ не суперечить наявним даним. На рис. Л6.1 наведено гістограму розподілу елементів послідовності, побудованої за даними табл. Л6.2.

Проте результати тестування отриманої послідовності на періодичність та рівномірність є гіршими за попередні. З рис. Л6.2.а видно, що спостерігається наближена періодичність значень її елементів. Крім того, з результатів графічного тесту на плоскій сітці, наведених на рис. Л6.3.а, видно, що розподіл точок з координатами $(\xi_i, \xi_{i+10000})$ не є рівномірним. Водночас, як видно з рис. Л6.2.б і Л6.3.б, використаний алгоритм побудови псевдовипадкових рівномірних послідовностей за результатами останніх двох тестів не гірший за вбудований у пакет аналізу MS Excel алгоритм.

Таблиця Л6.2

Характеристики відрізків розбиття та дані про фактичні й теоретичні частоти попадання до них елементів одержаної послідовності

№	Верхня границя відрізка	Фактична кількість елементів	Очікувана кількість елементів
1	0,045455	438	454,5455
2	0,090909	436	454,5455
3	0,136364	487	454,5455
4	0,181818	494	454,5455
5	0,227273	450	454,5455
6	0,272727	449	454,5455
7	0,318182	447	454,5455
8	0,363636	475	454,5455

⁴ Для рівномірного розподілу немає необхідності обирати n^* непарним.

№	Верхня границя відрізка	Фактична кількість елементів	Очікувана кількість елементів
9	0,409091	413	454,5455
10	0,454545	493	454,5455
11	0,5	433	454,5455
12	0,545455	442	454,5455
13	0,590909	449	454,5455
14	0,636364	459	454,5455
15	0,681818	456	454,5455
16	0,727273	465	454,5455
17	0,772727	472	454,5455
18	0,818182	435	454,5455
19	0,863636	466	454,5455
20	0,909091	448	454,5455
21	0,954545	435	454,5455
22	1	458	454,5455

Для використання пакета аналізу MS Excel при побудові псевдовипадкових послідовностей необхідно виконати такі кроки. У пункті меню "Сервіс" вибираємо "Пакет аналізу", потім – "Генерація випадкових чисел". У діалоговому вікні "Генерація випадкових чисел" вибираємо: кількість змінних – 1 (якщо ми будемо одну псевдовипадкову послідовність), кількість випадкових чисел – наприклад, 10000 (якщо нам треба отримати 10000 елементів послідовності), розподіл – рівномірний, параметри – між 0 та 1. У комірці "Параметри виведення" вказуємо індекс верхньої комірки робочого аркуша, звідки треба розпочати виведення елементів послідовності. Результати можна також виводити на новому робочому аркуші або в новій робочій книжці.

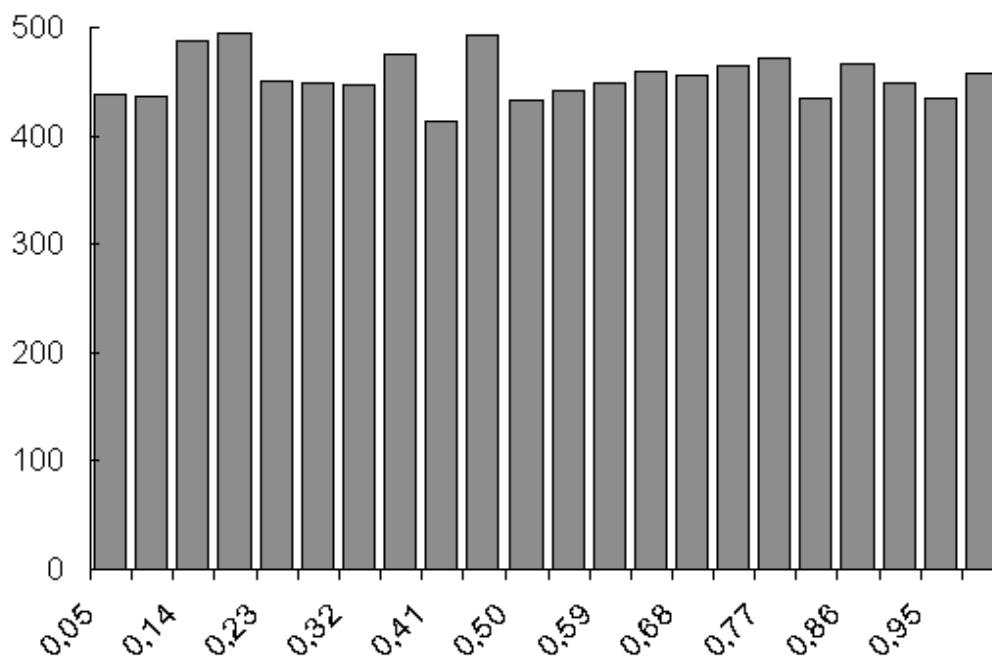
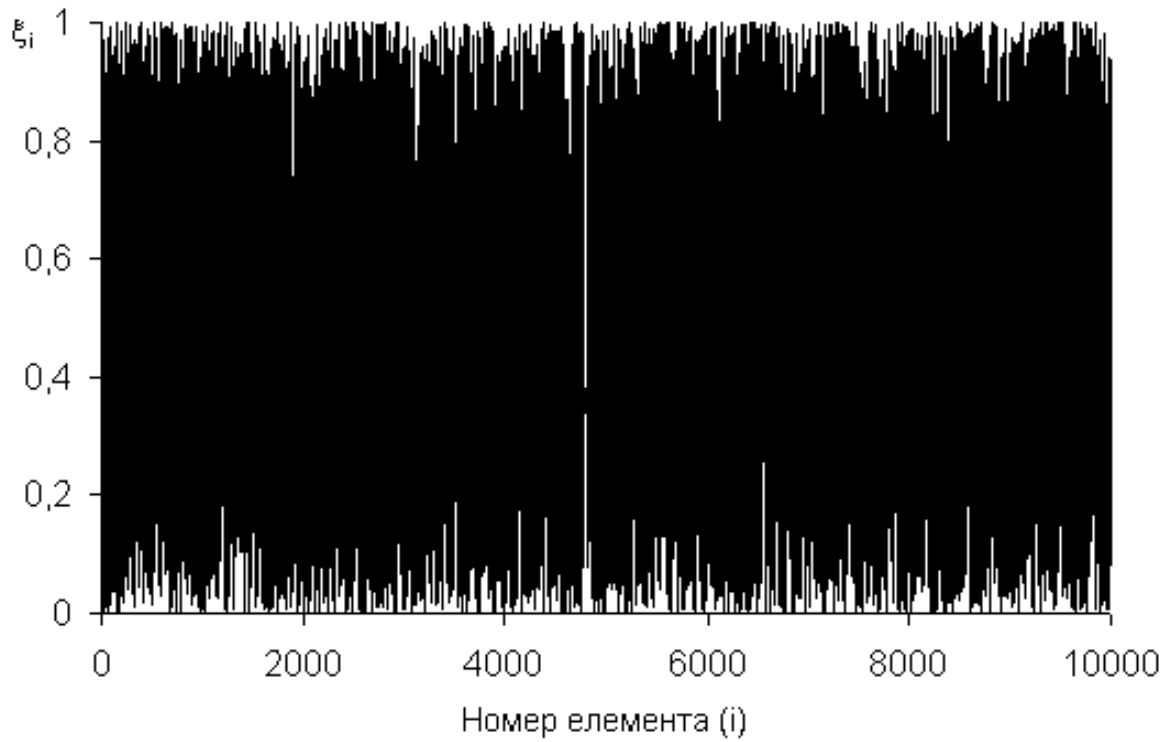
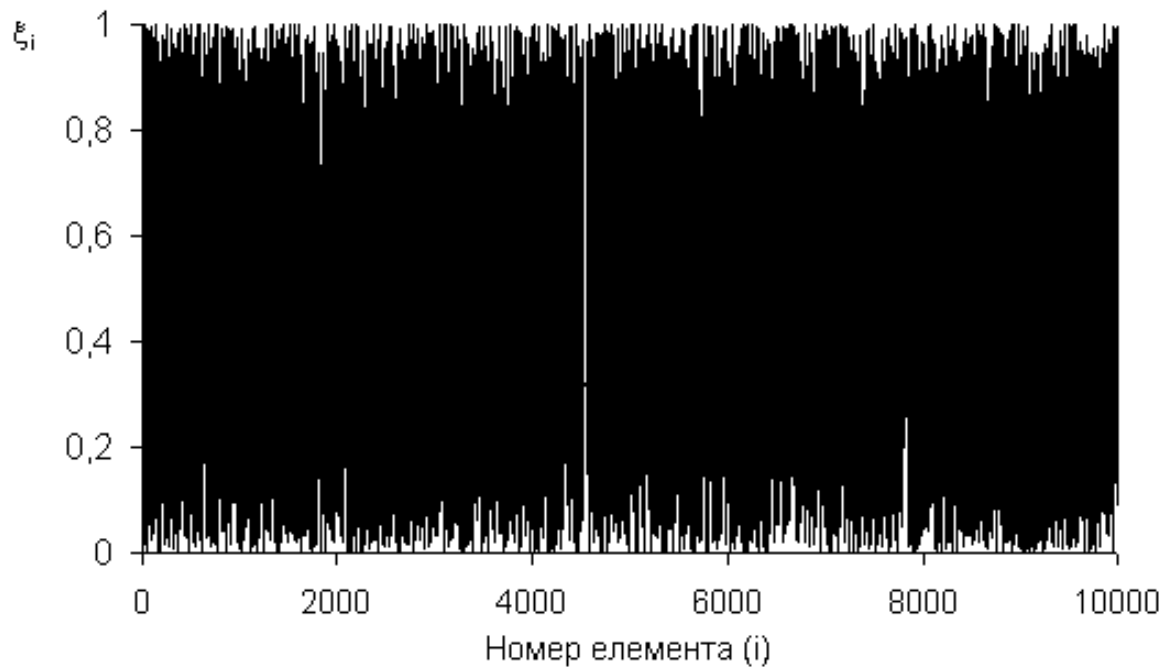


Рис. Лб.1. Гістограма отриманої за наведеним алгоритмом псевдовипадкової послідовності



а



б

Рис. Лб.2. Діаграми послідовності значень елементів псевдовипадкової послідовності, побудованої за наведеним алгоритмом, (а) і послідовності, отриманої за допомогою пакета аналізу MS Excel, (б)

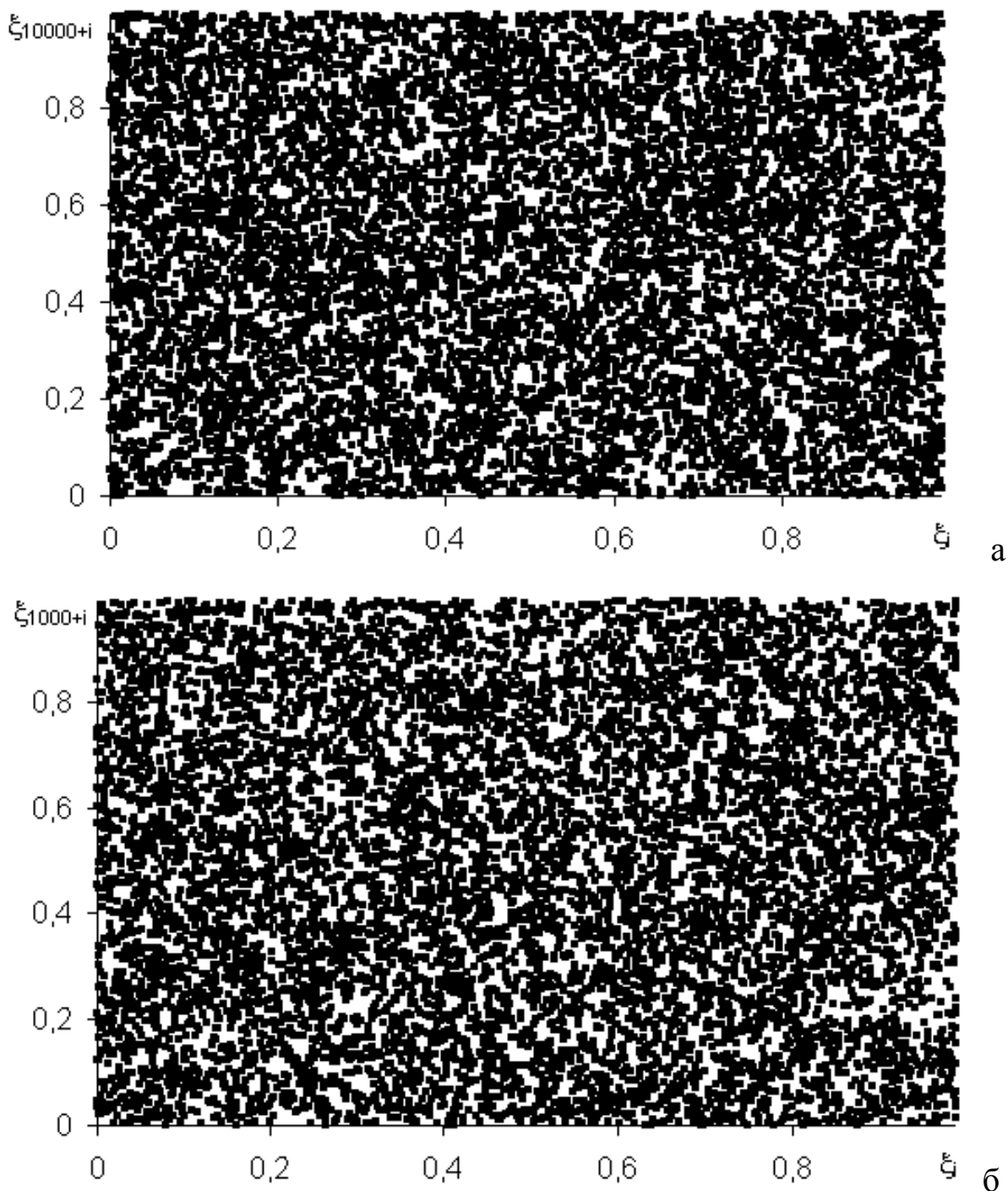


Рис. 6.3. Результати графічного тесту псевдовипадкової послідовності, побудованої за наведеним алгоритмом, (а) і послідовності, отриманої за допомогою пакета аналізу MS Excel, (б)

Після побудови рівномірної псевдовипадкової послідовності можна переходити до побудови послідовності із заданим законом розподілу. Розглянемо цю процедуру на прикладі нормально розподіленої послідовності. Першим етапом є побудова послідовності ζ_i , що має рівномірний розподіл на відрізьку $[-1, 1]$. Її елементи можна розрахувати, використовуючи отримані нами рані-

ше елементи ξ_i послідовності з рівномірним розподілом на відрізку $[0, 1]$, за формулою $\zeta_i = 2\xi_i - 1$.

Чергові елементи нормально розподіленої послідовності можна генерувати за такою схемою:

$$(Л6.3)$$

На рис. Л6.4 наведено гістограму розподілу перших 2000 елементів одержаної послідовності. За критерієм χ^2 імовірність її відхилення від нормального закону розподілу з параметрами становить близько 1 %.

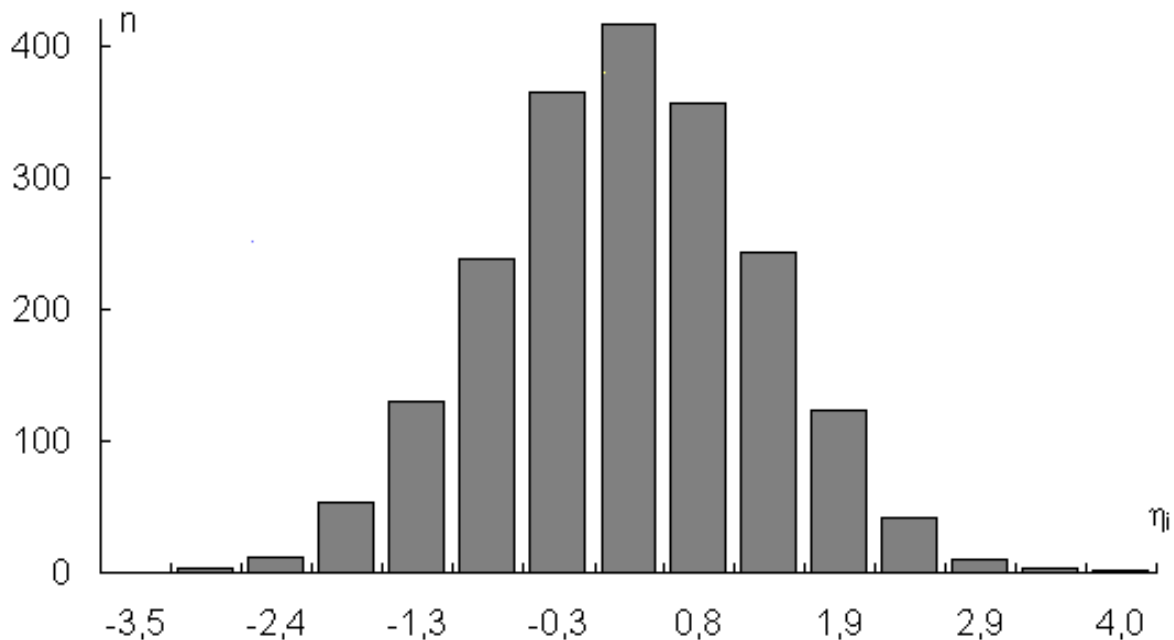


Рис. Л6.4. Гістограма розподілу елементів нормальної псевдовипадкової послідовності

Контрольні запитання

1. Поняття "функція розподілу", "щільність розподілу".
2. Визначення математичного сподівання, дисперсії, моментів n -го порядку.
3. Фізичні методи генерації випадкових чисел.
4. Алгоритми отримання псевдовипадкових рівномірних послідовностей.
5. Методи тестування рівномірних псевдовипадкових послідовностей.
6. Загальна схема отримання псевдовипадкової послідовності із заданим законом розподілу.
7. Алгоритми отримання псевдовипадкових послідовностей з нормальним законом розподілу.
8. Засоби генерації випадкових послідовностей у таблицях MS Excel та у пакеті MathCad.

ЛІТЕРАТУРА

Нижче наведено перелік навчальних посібників та наукових видань із загальних та спеціальних питань математичного моделювання, що рекомендуються для поглибленого вивчення дисципліни.

Монографії та навчальні посібники

1. Ажогин В.В., Згуровский М.З. Моделирование на цифровых, аналоговых и гибридных ЭВМ. – К.: Вища школа, 1983.
2. Амелькин В.В. Дифференциальные уравнения в приложениях. – М.: Наука, 1987.
3. Антипов Б.Л., Сорокин В.С., Терехов В.А. Материалы электронной техники. Задачи и вопросы. – М.: Высшая школа, 1990.
4. Ахо А., Хопкрофт Дж., Ульман Дж. Построение и анализ вычислительных алгоритмов. – М.: Мир, 1979.
5. Бабенко К.И. Основы численного анализа. – М.: Наука, 1986.
6. Бахвалов Н.С., Жидков Н.Н., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Наука, 1987.
7. Бахрушин В.С. Математичне моделювання фізичних систем і процесів. – Запоріжжя: ГУ “ЗІДМУ”, 2002.
8. Бенькович Е., Колесов Ю., Сениченков Ю. Практическое моделирование динамических систем. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
9. Березин Ю.А. Моделирование нелинейных волновых процессов. – Новосибирск: Наука, 1982.
10. Бубенников А.Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. – М.: Высшая школа, 1989.
11. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. – М.: Наука, 1968.
12. Гайдышев И. Анализ и обработка данных: Специальный справочник. – СПб.: Питер, 2001.
13. Гамаюн И.П. Разработка имитационных моделей на основе сетей Петри. – Харьков: НТУ ХПИ, 2002.
14. Глушков В.М., Иванов В.В., Яненко В.М. Моделирование развивающихся систем. – М.: Наука, 1983.
15. Гуссейнова А.С., Павловский Ю.Н., Устинов В.А. Опыт имитационного моделирования исторического процесса. – М.: Наука, 1984.
16. Дадаян В.С. Макроэкономические модели. – М.: Наука, 1983.
17. Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ / Отв. ред. Ю.А. Осипьян. – Л.: Наука, 1980.
18. Дикий Н.А., Халатов А.А. Основы научных исследований. – К.: Вища школа, 1985.
19. Дорохина Е.Ю., Халиков М.А. Моделирование микроэкономики. – М.: Экзамен, 2003.

20. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2 т. – М.: Финансы и статистика, 1987.
21. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1971.
22. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982.
23. Згуровский М.З., Мельник В.С. Нелинейный анализ и управление бесконечномерными системами. – К.: Наукова думка, 1999.
24. Згуровский М.З., Новиков А.Н. Системный анализ стохастических распределенных процессов (моделирование, оценивание состояний, идентификация). – К.: Вища школа, 1988.
25. Иванилов Ю.П., Лотов А.В. Математические модели в экономике. – М.: Наука, 1979.
26. Ивахненко А.Г., Мюллер И.А. Самоорганизация прогнозирующих моделей. – К.: Техника, 1985.
27. Ивахненко А.Г., Юрачковский Ю.П. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. – М.: Радио и связь, 1986.
28. Иващенко П. Моделювання транзакційних процесів в економіці України. – Харків: ХНУ, 2002.
29. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химического производства. – М.: Высшая школа, 1991.
30. Кирсанов В.В. ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. – М.: Энергоатомиздат, 1990.
31. Киттель Ч., Найт У., Рудерман М. Механика / Берклевский курс физики. – В 6 т. – Т. 1. – М.: Наука, 1975.
32. Ковальчук П.І. Моделювання і прогнозування стану навколишнього середовища. – К.: Либідь, 2003.
33. Конюховский П.В. Микроэкономическое моделирование банковской деятельности. – СПб.: Питер, 2001.
34. Костицын В.А. Эволюция атмосферы, биосферы и климата. – М.: Наука, 1984. – 96 с.
35. Крапивин В.Ф., Свирижев Ю.М., Тарко А.М. Математическое моделирование глобальных биосферных процессов. – М.: Наука, 1982.
36. Лавренчик В.Н. Постановка физического эксперимента и статистическая обработка его результатов. – М.: Энергоатомиздат, 1986.
37. Лебедев В.В. Математическое моделирование социально-экономических процессов. – М.: Изограф, 1997.
38. Лотов А.В. Введение в экономико-математическое моделирование. – М., 1984.
39. Ляшенко И.Н. Макромодели экономического роста. – К.: Вища школа, 1979.
40. Ляшенко І.М. Економіко-математичні методи та моделі сталого розвитку. – К.: Вища школа, 1999.

41. Макаров В.Л. Математическая теория экономической динамики и равновесия. – М.: Наука, 1973.
42. Малыхин В.И. Математическое моделирование. – М.: УРАО, 1997.
43. Малыхин В.И. Математическое моделирование экономики. – М.: УРАО, 1998.
44. Малыхин В.И. Социально-экономическая структура общества: Математическое моделирование. – М.: ЮНИТИ, 2003.
45. Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях. – М.: Мир, 1983.
46. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблемах окружающей среды. – М.: Наука, 1982.
47. Математическое моделирование. Процессы в сложных экономических и экологических системах / Под ред. А.А. Самарского, Н.Н. Моисеева, А.А. Петрова. – М., 1986.
48. Машинное моделирование при исследовании кристаллов / Под ред. Д.Б. Позднеева. – М.: Мир, 1974.
49. Милованов В.П. Неравновесные социально-экономические системы: Синергетика и самоорганизация. – М.: УРСС, 2001.
50. Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах / Отв. ред. Ю.А. Осипьян. – Л.: Наука, 1990.
51. Моисеев Н.Н. Математические задачи системного анализа. – М.: Наука, 1981.
52. Моисеев Н.Н., Александров В.В., Тарко А.М. Человек и биосфера. Опыт системного анализа и эксперименты с моделями. – М.: Наука, 1985.
53. Оксендаль Б. Стохастические дифференциальные уравнения: Введение в теорию и приложения. – М.: Мир, 2003.
54. Павлов И.Д. Модели управления проектами. – Запорожье: ЗГИА, 1999.
55. Парселл Э. Электричество и магнетизм / Берклевский курс физики. – В 6 т. – Т. 2. – М.: Наука, 1975.
56. Перегудов Ф.И., Тарасенко Ф.П. Введение в системный анализ. – М.: Высшая школа, 1989.
57. Петров А.А., Пospelов И.Г., Шананин А.А. Опыт математического моделирования экономики. – М.: Энергоатомиздат, 1996.
58. Плотинский Ю.М. Теоретические и эмпирические модели социальных процессов. – М.: Логос, 1998.
59. Полуэктов Р.А., Пых Ю.А., Швытов И.А. Динамические модели экологических систем. – Л.: Гидрометеиздат, 1980.
60. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. – М.: Наука, 1984.
61. Росадо Л. Физическая электроника и микроэлектроника. – М.: Высшая школа, 1991.
62. Салтанов Н.В., Горбань В.А. Вихревые структуры в жидкости: Аналитические и численные решения. – К.: Наукова думка, 1993.

63. Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1982.
64. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М.: Наука, 1997.
65. Семененко М.Г. Введение в математическое моделирование. – М.: СОЛОН-Р, 2002.
66. Сергеева Л.Н. Моделирование поведения экономических систем методами нелинейной динамики (теории хаоса). – Запорожье: ЗГУ, 2002.
67. Сергеева Л.Н. Моделирование структуры экономических систем и процессов. – Запорожье: ЗГУ, 2002.
68. Сергеева Л.Н. Нелинейная экономика: Модели и методы. – Запорожье: ЗГУ, 2003.
69. Ситник В.Ф. Основы научных исследований. – К.: Вища школа, 1978.
70. Ситник В.Ф., Орленко Н.С. Імітаційне моделювання. – К.: КНЕУ, 1998.
71. Советов Б.Я., Яковлев С.А. Моделирование систем. – М.: Высшая школа, 1998.
72. Советов Б.Я. Моделирование систем: Практикум. – М.: Высшая школа, 1999.
73. Тамм И.Е. Основы теории электричества. – М.: Наука, 1989.
74. Тинбирхэн Я., Бос Х. Математические модели экономического роста. – М.: Прогресс, 1967.
75. Тихонов А.Н., Кальнер В.Д., Гласко В.Б. Математическое моделирование технологических процессов и метод обратных задач в машиностроении. – М.: Машиностроение, 1990.
76. Трудоношина В.А., Пивоварова Н.В. Математические модели технических объектов. – Минск: Вышэйшая школа, 1988.
77. Турчак Л.И. Основы численных методов. – М.: Наука, 1987.
78. Хазанов Л.Э. Математическое моделирование в экономике. – М.: БЕК, 1998.
79. Хакен Г. Синергетика. – М.: Мир, 1980.
80. Хан Г., Шапиро С. Статистические модели в инженерных задачах. – М.: Статистика, 1980.
81. Харин Ю.С., Малюгин В.И., Кирлица В.П. Основы имитационного и статистического моделирования. – Минск: Дизайн ПРО, 1997.
82. Хастингс Н., Пикок Дж. Справочник по статистическим распределениям. – М.: Статистика, 1980.
83. Шеннон Р. Имитационное моделирование систем – искусство и наука. – М.: Мир, 1978.
84. Шрейдер Ю.А., Шаров А.А. Системы и модели. – М.: Радио и связь, 1982.
85. Экланд И. Элементы математической экономики. – М.: Мир, 1983.
86. Экономико-математические методы и прикладные модели / Под ред. В.В. Федосеева. – М.: ЮНИТИ, 1999.
87. Экономическая динамика / Ю.Г. Лысенко, В.Л. Петренко, В.Н. Тимохин, А.В. Филиппов. – Донецк: ДонГУ, 2000.

Періодичні наукові видання з математичного моделювання й суміжних питань

1. Автоматика и телемеханика.
2. Динамические системы.
3. Дискретный анализ и исследование операций.
4. Дифференциальные уравнения и процессы управления.
5. Журнал вычислительной математики и математической физики.
6. Известия РАН. Серия: Техническая кибернетика.
7. Кібернетика та системний аналіз.
8. Математическая физика. Анализ. Геометрия.
9. Математичне моделювання.
10. Проблемы кибернетики.
11. Проблемы управления и информатики.
12. Системні технології.
13. Системные исследования.
14. Складні системи і процеси.
15. Теоретическая и математическая физика.
16. Управляющие системы и машины.
17. Экономика и математические методы.
18. Экономическая кибернетика.
19. Econometrica.
20. Economic Modeling.
21. Electronic Transactions on Numerical Analysis.
22. Journal of Association of Computing Machinery.
23. Journal of Economic Behavior and Organization.
24. Journal of Economic Dynamic and Control.
25. Journal of Mathematical Economics.
26. Journal of Molecular Modeling.
27. Management Science.
28. Management Technology.
29. Operation Research.
30. The Journal of Non-linear Oscillations.

Додаток 1

СФЕРИЧНІ ФУНКЦІЇ

$$l = 0 : Y_{00} = 1/4\pi;$$

$$l = 1: \quad \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \cos\phi \quad \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \sin\phi$$

$$l = 2: \quad \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \quad \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cos\theta \sin\theta \cos\phi \quad \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cos\theta \sin\theta \sin\phi$$

$$\sqrt{\frac{15}{64\pi}} \sin^2\theta \cos 2\phi \quad \sqrt{\frac{15}{64\pi}} \sin^2\theta \sin 2\phi$$

$$l = 3: \quad \sqrt{\frac{35}{64\pi}} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta) \quad \sqrt{\frac{105}{128\pi}} \cos\theta \sin\theta (3\cos^2\theta - 1) \cos\phi$$

$$\sqrt{\frac{105}{128\pi}} \cos\theta \sin\theta (3\cos^2\theta - 1) \sin\phi \quad \sqrt{\frac{105}{256\pi}} \sin^2\theta \cos\theta \cos 2\phi$$

$$\sqrt{\frac{105}{256\pi}} \sin^2\theta \cos\theta \sin 2\phi \quad \sqrt{\frac{105}{256\pi}} \sin^3\theta \sin 3\phi$$

РАДІАЛЬНІ ФУНКЦІЇ

1s-стан: $P_{10}(\rho) = \frac{2}{\alpha} e^{-\rho/\alpha}$

2s-стан: $\frac{2}{\alpha^2} \left(1 - \frac{\rho}{\alpha}\right) e^{-\rho/\alpha}$

2p-стан: $\frac{4}{\alpha^2} \rho e^{-\rho/\alpha}$

3s-стан: $\frac{2}{\alpha^3} \left(2 - \frac{3\rho}{\alpha} + \frac{\rho^2}{\alpha^2}\right) e^{-\rho/\alpha}$

3p-стан: $\frac{12}{\alpha^3} \rho \left(1 - \frac{\rho}{\alpha}\right) e^{-\rho/\alpha}$

3d-стан: $\frac{24}{\alpha^3} \rho^2 e^{-\rho/\alpha}$

ЗМІСТ

Вступ.....	3
1. Загальні питання математичного моделювання.....	4
1.1. Приклади математичних моделей	4
1.2. Класифікації і методи дослідження математичних моделей.....	7
1.3. Основні властивості математичних моделей.....	14
1.4. Загальна схема математичного моделювання	16
2. Статистичне моделювання	21
2.1. Метод Монте-Карло	21
2.2. Рівномірні випадкові послідовності (РВП).....	23
2.3. Загальні методи генерування випадкових послідовностей із заданими законами розподілу.....	28
2.4. Спеціальні методи генерування випадкових послідовностей з деякими законами розподілу.....	31
2.5. Моделювання багатовимірних випадкових векторів	36
3. Імітаційне моделювання	40
3.1. Основні етапи імітаційного моделювання.....	40
3.2. Побудова концептуальної моделі	42
3.3. Логічні структурні схеми імітаційних моделей.....	43
3.4. Операторні схеми імітаційних моделей	48
3.5. Реалізація імітаційних моделей	49
3.6. Імітаційна модель управління запасами.....	50
4. Регресійні моделі.....	55
4.1. Загальна характеристика методів та задач регресійного аналізу	55
4.2. Лінійні моделі	60
4.3. Поліноміальні моделі	69
5. Моделювання дефектів У кристалах	73
5.1. Метод молекулярної динаміки	73
5.2. Варіаційний метод	80
5.3. Обрання межових та початкових умов.....	80
6. Динамічні системи	83

ЛАБОРАТОРНИЙ ПРАКТИКУМ

Вступ	89
Лабораторна робота № 1	
Задача трьох тіл: моделювання траєкторії руху	91
Лабораторна робота № 2	
Моделювання хвильових функцій мікросистеми.....	97
Лабораторна робота № 3	
Моделювання перехідних явищ у провідниках (розрахунок часової залежності сили струму через провідник).....	101
Лабораторна робота № 4	
Моделювання температурної залежності питомого електричного опору напівпровідника	107
Лабораторна робота № 5	
Моделювання згасаючих коливань	114
Лабораторна робота № 6	
Побудова випадкових послідовностей.....	121
ЛІТЕРАТУРА	130
Монографії та навчальні посібники	130
Періодичні наукові видання з математичного моделювання й суміжних питань	134
Додаток 1	
Сферичні функції	135
Додаток 2	
Радіальні функції.....	136

Навчальне видання

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Бахрушин Володимир Євгенович
доктор фізико-математичних наук, доцент

Наукові редактори: д.ф.-м.н., доцент Г.В. Корніч, к.т.н. В.М. Буйницька
Редактори Н.С. Ігнатова, А.О. Бессараб
Технічний редактор І.В. Голомб
Коректори: А.О. Купіна, Т.О. Сагайдак

Підписано до друку _____
Формат 60×84/16 Гарнітура Times
Обл.-вид.арк. 7,41 Тираж 300

Видавництво
Гуманітарного університету
“Запорізький інститут державного та муніципального управління”
Свідоцтво Державного комітету інформаційної політики, телебачення
та радіомовлення України про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції
Серія ДК № 388 від 28.03.2001 р.

Виготовлено на поліграфічній базі Гуманітарного університету "ЗІДМУ"
69002, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 70б