Государственный Комитет Российской Федерации

по высшему образованию

Якутский Государственный Университет

им. М.К. Аммосова

Институт Математики и Информатики

**Реферат**

по Введению в специальность

“Прикладная математика”

на тему:

**Вычислительный эксперимент**

Выполнил студент

гр. ПМ-98

Баягантаев А.Ю.

/ /

08 ноября 1999 г.

Проверил преподаватель

Охлопков Н.М.

1999 Якутск.

**Содержание**

1. Введение.
2. Вычислительный эксперимент.
3. Основные этапы вычислительного эксперимента.
4. Сферы применения вычислительного эксперимента и математического моделирования.
5. Результаты расчёта последствий ядерного конфликта.
6. Пакеты прикладных программ.
7. Заключение.
8. Список использованной литературы.

**1. Введение.**

Ни одно техническое достижение не повлияло так на интеллектуальную деятельность че­ловека, как электронно-вычислительные машины. Увеличив в десятки и сотни миллионов раз скорость выполнения арифметических и логических операций, колоссально повысив тем самым производительность интеллектуального труда человека, ЭВМ вызвали коренные изменения в об­ласти обработки информации. По существу, мы являемся свидетелями своего рода “информационной революции”, подобной той промышленной революции, которую породило в 18 веке изобретение паровой машины и связанное с ним резкое повышение производительности физического труда. В настоящее время вычислительные машины проникают во все сферы интел­лектуальной деятельности человека, становятся одним из решающих факторов ускорения темпов научно-технического прогресса.

К концу 20 века компьютеры стали настолько совершенными, что появилась реальная воз­можность использовать их в научных исследованиях, не только как большой арифмометр, но об­ратиться с его помощью к изучению таких разделов математики, которые ранее были практически не доступны для исследований. Это было осознано при решении ещё на несовершенных ЭВМ сложных математических задач ядерной физики, баллистики, прикладной небесной механики.

Классическая математика, как известно, в основном нацелена на изучение явлений, имею­щих линейный характер, то есть способна изучать ситуации где причина приблизительно пропор­циональна следствию. Изменение причины приводит к пропорциональному изменению следст­вия, то есть классические уравнения рассматривают: не градиентные среды ( они изучают малые отклонения маятника, мелкие волны и дифференциал и т.д. )

После Второй Мировой Войны наука вплотную приблизилась к изучению явлений, яв­ляющихся не линейными, где причина и следствие не соизмеримы, именно благодаря таким явле­ниям возникли: электронные лампы, транзисторы, компьютеры, лазеры, появились высокоточные приборы способные избирать нужный сигнал, в большинстве случаев такие явления очень плохо поддаются традиционным методам анализа. Описывающие такие ситуации уравнения во многих случаях являются обыкновенными дифференциальными уравнениями, которые однако не имеют решения формами записи. Такие уравнения можно изучать и исследовать с помощью компьюте­ра.

В дальнейшем, развиваясь и совершенствуясь при решении разнообразных задач, этот стиль теоретического анализа трансформировался в новую современную технологию и методоло­гию проведения теоретических исследований, которая получила название вычислительного экс­перимента. Основой вычислительного эксперимента является математическое моделирование, теоретической базой - прикладная математика, а технической - мощные электронно-вычислитель­ные машины

К началу 70-х годов были обнаружены новые явления, а точнее на них обратили внимание, новые явления, которые ранее не предполагались. Оказалось, например, что возникающая в усло­виях землетрясения или резкого взрыва уединённая волна, получившая название “Саметон”, об­ладает удивительной устойчивостью. Это было смоделировано в численном эксперименте и на­блюдалось на практике. Математическая теория этого не линейного явления не была известна. Численные исследования позволили уяснить условия возникновения, распространения и свойства этого явления, этой волны. Другое важное открытие сделанное численным ( или вычислительным ) экспериментом это хаос в детерминированных ( описанных чёткой формулой ) системах, и хотя первые наблюдения таких явлений были выполнены ещё в начале 50-х годов, долгое время они рассматривались как несовершенство компьютеров, неспособных правильно вычислять. Изучение таких явлений, в ча­стности связанных с ними фракталов, привело к колоссальным сдвигам в со­временных научных представлениях. Возникла целая группа нелинейных наук, с которой связаны по истине удиви­тельные открытия последних лет.

**2. Вычислительный эксперимент.**

Научное исследование реального процесса можно проводить теоретически или экспери­ментально, которые проводятся независимо друг от друга. Такой путь познания истины носит од­носторонний характер. В современных условиях развития науки и техники стараются проводить комплексное исследование объекта. Этого можно добиться на основе новой, удовлетворяющей требованиям времени, методологии и технологии научных исследований.

Широкое применение ЭВМ в математическом моделировании, достаточно мощная теоре­тическая и экспериментальная база позволяют говорить о вычислительном эксперименте как о новой технологии и методологии в научных и прикладных исследованиях.

*Вычислительный эксперимент* - это эксперимент над математической моделью объекта на ЭВМ, который состоит в том, что по одним параметрам модели вычисляются другие её парамет­ры и на этой основе делаются выводы о свойствах явления, описываемого математической моде­лью.

В проведении вычислительного эксперимента участвует коллектив исследователей - спе­циалисты с конкретной предметной области, математики теоретики, вычислители, прикладники, программисты. Это связано с тем, что моделирование реальных объектов на ЭВМ включает в себя большой объём работ по исследованию их физической и математической моделей, вычисли­тельных алгоритмов[[1]](#footnote-1), программированию[[2]](#footnote-2) и обработке результатов. Здесь можно заметить анало­гию с работами по проведению натурных экспериментов: составление программы экспериментов, создание экспериментальной установки, выполнение контрольных экспериментов, проведение серийных опытов, обработки экспериментальных данных и их интерпретация и т.д. Таким обра­зом, проведение крупных комплексных расчётов следует рассматривать как эксперимент, прово­димый на ЭВМ или вычислительный эксперимент.

Вычислительный эксперимент играет ту же роль, что и обыкновенный эксперимент при исследованиях новых гипотез. Современная гипотеза почти всегда имеет математическое описа­ние, над которым можно выполнять эксперименты.

При введении этого понятия следует особо выделить способность компьютера выполнять большой объем вычислений, реализующих математические исследования. Иначе говоря, компью­тер позволяет произвести замену физического, химического и т. д. эксперимента экспериментом вычислительным.

При проведении вычислительного эксперимента можно убедиться в необходимости и по­лезности последнего, особенно в случаях, когда провести натуральный эксперимент затрудни­тельно или невозможно. Вычислительный эксперимент, по сравнению с натурным, значительно дешевле и доступнее, его подготовка и проведение требует меньшего времени, его легко переде­лывать, он даёт более подробную информацию. Кроме того, в ходе вычислительного эксперимен­та выявляются границы применимости математической модели, которые позволяют прогнозиро­вать эксперимент в естественных условиях. Поэтому использование вычислительного экспери­мента ограничивается теми математическими моделями, которые участвуют в проведении иссле­дования. По этой причине вычислительный эксперимент не может заменить полностью экспери­мент натурный и выход из этого положения состоит в их разумном сочетании. В это случае в проведении сложного эксперимента используется широкий спектр математических моделей: пря­мые задачи, обратные задачи, оптимизированные задачи, задачи идентификации.

Использование вычислительного эксперимента как средства решения сложных приклад­ных проблем имеет в случае каждой конкретной задачи и каждого конкретного научного коллек­тива свои специфические особенности. И тем не менее всегда чётко просматриваются общие ха­рактерные основные черты, позволяющие говорить о единой структуре этого процесса. В на­стоящее время технологический цикл вычислительного эксперимента принято подразделять на ряд технологических этапов. И хотя такое деление в значительной степени условно, тем не менее оно позволяет лучше понять существо этого метода проведения теоретических исследований. Те­перь давайте рассмотрим основные этапы вычислительного эксперимента.

**3. Основные этапы вычислительного эксперимента.**

В общем случае, основные этапы решения задачи с применением ЭВМ можно рассматри­вать как один технологический цикл вычислительного эксперимента. А вообще, вычислительный эксперимент как новая методика исследования "состоялся" после того, как удалось на каждом из этапов традиционной цепочки эффективно использовать вычислительную машину.

Все этапы технологического цикла вычислительного эксперимента тесно связаны между собой и служат единой цели - получению с заданной точностью за короткое время адекватного количественного описания поведения изучаемого реального объекта в тех или иных условиях. Поэтому все этапы технологического цикла должны быть одинаково прочными. Слабость в од­ном звене влечёт за собой слабость в остальных звеньях технологии.

Теперь основные этапы вычислительного эксперимента:

* Проведение натурного эксперимента
* Построение математической модели
* Выбор и применение численного метода для нахождения решения
* Обработка результатов вычислений
* Сравнение с результатами натурного эксперимента
* Принятие решения о продолжении натурных экспериментов
* Продолжение натурного эксперимента для получения данных, необходимых для уточнения модели
* Накопление экспериментальных данных
* Построение математической модели
* Автоматическое построение программной реализации математической модели
* Автоматизированное нахождение численного решения
* Автоматизированное преобразования результатов вычислительных в форму, удобную для анализа
* Принятие решения о продолжении натурных экспериментов

Видоизмененная цепочка реализованная в виде единого программного комплекса и со­ставляет "технологию" вычислительного эксперимента.

В наиболее общем виде этапы вычислительного эксперимента можно представить в виде последовальности технологических операций (они реализованы в соответствующих блоках про­граммного комплекса):

Построение математической модели.

Преобразование математической модели.

Планирование вычислительного эксперимента.

Построение программной реализации математической модели

Отладка и тестирование программной реализации.

Проведение вычислительного эксперимента.

Документирование эксперимента.

Для проведения крупномасштабных научных исследований используется модульная техно­логия, основанная на модульном представлении: математических моделей; вычислительных алго­ритмов; программ для ЭВМ; технических средств. Сборка программ из модулей проводится авто­матически, с помощью специальной программы. Создаются программные комплексы и проблем­но-ориентированные пакеты прикладных программ многоцелевого назначения. Характерная осо­бенность пакетов состоит в возможности постоянного развития, расширения благодаря включе­нию новых модулей, реализующих новые возможности. Следует отметить, что один и тот же па­кет прикладных программ может быть использован в вычислительных экспериментах для иссле­дований различных реальных объектов.

**4. Сферы применения вычислительного эксперимента и математического моделирования.**

В современной науке и технике появляется всё больше областей, задачи в которых можно и нужно решать методом вычислительного эксперимента, с помощью математического модели­рования. Обратим внимание на некоторые из них.

*Энергетическая проблема.* Прогнозирование атомных и термоядерных реакторов на осно­ве детального математического моделирования происходящих в них физических процессов. В этой области работа ведётся очень успешно. Вычислительный эксперимент тесно сопрягается с натурным экспериментом и помогает, заменяет и удешевляет весь исследовательский цикл, суще­ственно его ускоряя.

*Космическая техника.* Расчёт траекторий летательных аппаратов, задачи обтекания, систе­мы автоматического проектирования. Обработка данных натурного эксперимента, например ра­диолокационных данных, изображений со спутников, диагностика плазмы. Здесь очень важной оказывается проблема повышения качества приборов, и в частности измерительной аппаратуры. Между тем, в настоящее время показано, что, используя измерительный прибор среднего качества и присоединив к нему ЭВМ, можно на основе специальных алгоритмов получить результаты, ко­торые дал бы измерительный прибор очень высокого качества. Таким образом, сочетание изме­рительного прибора с компьютером открывает новые возможности.

*Технологические процессы.* Получение кристаллов и плёнок, которые, кстати, нужны для создания вычислительной техники, для решения проблем в области элементарной базы ( что не­возможно без математического моделирования ); моделирование теплового режима конструктив­ных узлов перспективных ЭВМ, процессов лазерной плазмы, технологии создания материалов с заданными свойствами ( это одна из основных задач любой технологии ).

*Экологические проблемы.* Вопросы прогнозирования и управления экологическими систе­мами могут решаться лишь на основе математического моделирования, поскольку эти системы существуют в “единственном экземпляре”.

*Гео- и астрофизические явления.* Моделирование климата, долгосрочный прогноз погоды, землетрясений и цунами, моделирование развития звёзд и солнечной активности, фундаменталь­ные проблемы происхождения и развития Вселенной.

*Химия.* Расчёт химических реакций, определение их констант, исследование химических процессов на макро- и микроуровне для интенсификации химической технологии.

*Биология.* Особо следует отметить интерес к математическому моделированию в связи с изучением фундаментальных проблем этой науки ( генетики, морфогенеза ) и разработкой новых методов биотехнологии.

Классической областью математического моделирования является *физика.* До недавнего времени в физике микромира ( в квантовой теории поля ) вычислительный эксперимент не при­менялся, так как было принято использовать метод малого параметра, таким является постоянная тонкой структуры. Однако сейчас физики-теоретики пришли к выводу, что процессы в микромире сильно нелинейны , и поэтому необходимо переходить к численным методам, и для этой цели даже разрабатываются специальные компьютеры.

Анализ математических моделей с помощью вычислительного эксперимента с каждым го­дом завоёвывает новые позиции. В 1982 г. Нобелевская премия по физике была присуждена К. Вильсону, предложившему ряд фундаментальных моделей в теории элементарных частиц и кри­тических явлений, которые необходимо исследовать численно. В 1979 г. Нобелевской премией по медицине была удостоена работа в области вычислительной томографии ( восстановление объём­ного предмета по набору его сечений ). В 1982 г. Нобелевской премией по химии отмечена рабо­та, в которой методами вычислительной томографии восстанавливалась структура вируса по дан­ным электронной микроскопии.

Каждая из этих работ приводит к постановке глубоких математических задач, для решения которых необходим вычислительный эксперимент. При постановке вычислительного экспери­мента в различных областях используются пакеты прикладных программ.

**5. Результаты расчёта последствий ядерного конфликта.**

Вычислительный эксперимент является основным научным методом, применяемым учёными многих стран при исследовании “парникового” эффекта - повышения температуры в околоземном пространстве в результате резкого увеличения в атмосфере количества двуокиси углерода ( СО2 ). Конечно, математические модели глобального и регионального изменения климата пока далеки от совершенства, и, следовательно, результаты вычислительного эксперимента не могут считаться абсолютно достоверными. Естественно, по мере совершенствования моделей точность результатов экспериментов возрастёт, но уже сейчас полученные данные заставляют по-новому взглянуть на последствия человеческой деятельности для экологии.

С помощью вычислительного эксперимента учёные смогли ответить на один из важнейших вопросов современности: к каким изменениям климата и атмосферы приведёт использование ядерного оружия в военных конфликтах? Его разрушающее и уничтожающее действие известно: взрывы чрезвычайной мощности с выделением громадной энергии, ударная волна, сметающая всё на своём пути, радиоактивное заражение местности. Но до последнего времени наши знания о характере и масштабе ядерной катастрофы были не полными. Не рассматривалось влияние ядерных взрывов на изменение климата планеты и связанное с ним изменение среды обитания человека. Оказалось, что изменения климата в результате ядерных взрывов долговременны и наблюдаются на значительных расстояниях от мест взрывов.

В течении 15 лет, в 70-80-е гг., в Вычислительном центре АН СССР под руководством академика Н.Н. Моисеева проводились работы по моделированию климата. Была создана климатическая модель, которая включала в себя гидродинамическую модель общей циркуляции атмосферы и термодинамическую модель верхнего слоя океана. Учёные ввели уравнения, описывающие процессы переноса солнечной энергии и твёрдых частиц. С помощью этой модели были проведены вычислительные эксперименты по изучению последствий ядерной войны. Вот их результаты. После ядерных бомбардировок возникнут массовые пожары, которые будут сопровождаться выбросом в атмосферу продуктов сгорания - сажи и пепла, а также пыли. Количество выбросов загрязнений будет зависеть от силы ядерных взрывов. Облака, состоящие из твёрдых частиц, поглотят и рассеют солнечный свет, что приведёт к затемнению поверхности Земли и нарушению её радиационного баланса. Температура Земли за короткий срок понизится на 15-25°С. Наступит так называемая ядерная зима. Максимальное снижение температуры приповерхностного слоя атмосферы наблюдается на Северном полушарии, однако, несмотря на локальное незначительное повышение температуры в отдельных районах южного полушария, похолодание распространяется и на эту часть планеты. При этом предполагается следующий сценарий конфликта. Атмосфера севернее 12° северной широты в июле внезапно загрязнилась сажей. Рассматривают, что выброс загрязнений соответствовал конфликту с использованием 50% ядерного боезапаса, накопленного на планете к 90-м годам 20-го века. Расчёты, проведённые для более мягких сценариев с использованием меньшего количества ядерного потенциала, показали, что температура понизится не так значительно, но эффекты качественно останутся теми же.

Очень важным фактором, влияющим на климат, оказалось изменение циркуляции атмосферы. Полушария Земли будут нагреваться неравномерно, и это приведёт к тому, что в течении примерно месяца холодные потоки воздуха вместе с остатками сажи устремятся из северного полушария в южное. Сначала появляются шлейфы дыма и пыли; в первую и вторую недели средние широты Северного полушария покрываются сплошной пеленой; через две-три недели струи дыма переходят экватор; через месяц вся Земля оказывается окутанной облаком дыма, то есть наступает “ядерная ночь”. На температуру атмосферы окажет влияние и изменение температуры океана. В силу колоссальных его объёмов он будет охлаждаться медленнее, чем поверхность суши. Температура воды понизится в среднем на 1°, воздуха над океаном - всего на несколько градусов. Однако из-за перепадов температур над сушей и океаном вдоль побережий возникнут жестокие ураганы, которые вызовут дополнительные жертвы и разрушения.

Похолодание на планете приведёт к гибели многих видов животных и растений. У человечества будет ну много шансов приспособиться к новой экологической обстановке. Подчеркнём ещё раз, что такая модель была построена для сценариев ограниченной, “контролируемой” ядерной войны. Аналогичные результаты были получены позже учёными США и Великобритании. Они использовали другие математические модели и более мощные вычислительные средства.

**6. Пакеты прикладных программ.**

Остановимся несколько подробнее на этом[[3]](#footnote-3) важном направлении современного програм­мирования. Чтобы лучше ощутить существующие здесь проблемы и понять пути их решения, об­ратимся к истории вопроса, благо история эта ещё весьма коротка.

Первые программисты писали “вручную”, в командах. Однако уже тогда, зарождавшийся вычислительный эксперимент характеризовался многомодельностью. Это означало, что в процес­се расчётов математическая модель, или вычислительный алгоритм, постоянно модифицирова­лась, видоизменялась. Всё это в первую очередь сказывалось на программе, в которую необходи­мо было вносить соответствующие изменения. Программист - автор программы, конечно же, не переписывал её каждый раз заново, просто в соответствующее место делалась нужная вставка, в программе появлялась очередная “заплата”. Помимо основного задания на программирование, заводилась специальная “тетрадь изменений”, куда, чтобы не запутаться, заносились все исправ­ления и переделки.

Если математическая модель претерпевала заметные изменения ( например, в уравнениях магнитной гидродинамики требовалось учесть не одну, а две компоненты вектора напряжённости магнитного поля или дополнительно учесть излучение ), то также естественно было не создавать новую программу, а “надстраивать” старую, уже хорошо зарекомендовавшую себя в расчётах.

Программа разрасталась, разветвлялась, её возможности повышались. С помощью такого комбайна можно было решать и прежние простые задачи. Чем сложнее становился программный комбайн, чем большими возможностями он обладал, тем обширнее становилась таблица ключе­вых параметров.

Постепенно программа превращалась в эдакого монстра, нашпигованного ключевыми па­раметрами. Новые “заплаты” ставились на старые, и в этих дебрях начинал путаться сам автор программы. В конце концов принималось решение переписать программу заново, а это означало, что придётся повторно тратить немалое время и силы на большую трудоёмкую работу.

Одним из средств борьбы с такими непроизводительными потерями являются пакеты при­кладных программ.

Пакет прикладных программ ( ППП ) состоит из функционального наполнения и систем­ной части. Функциональное наполнение представляет собой, грубо говоря, набор отдельных про­грамм, решающих конкретные задачи. Эти задачи объединены одной направленностью, или, как говорят, предметной областью. Дело в том, что ППП не является универсальным, он проблемно-ориентирован, т.е. предназначен для решения определённого класса задач.

Если это задачи механики сплошной среды, то в функциональное наполнение могут вхо­дить, например, программы для расчёта уравнений газовой динамики, уравнения теплопроводно­сти, уравнений для электромагнитного поля, уравнений для излучения, фазовых переходов и т.д.

Содержание каждой такой индивидуальной программы, или “модуля”, специфично, однако требования к оформлению входной и выходной информации унифицированы. Эти модули пред­ставляют собой своеобразные “чёрные ящики”, которые можно соединять в цепочки, ветви, так, чтобы в конце концов получить заданную программу.

Системная часть выполняет функции сервисного характера. Основные задачи здесь состоят в следующем. Прежде всего необходимо организовать хранение функционального наполнения. Но хранить в данном случае не значит ограничиться записью информации на каких-либо носите­лях. В этом архиве должен быть порядок: по первому требованию указанный модуль должен быть направлен “в работу”.

Главное назначение системной части ППП - обеспечивать возможность сборки из отдель­ных модулей полной программы, способной решать заданную задачу. Для этого вычислитель, создающий программу, должен общаться с пакетом - давать приказы, воспринимать ответную информацию.

Конечно же это очень упрощённая схема работы с пакетом, но она отражает характерные этапы такой деятельности.

Кроме того, для того чтобы пользоваться пакетом и, значит, грамотно вести расчёты, сов­сем не обязательно самому обладать высокой квалификацией программиста или математика-вы­числителя ( ведь именно они должны создавать эти пакеты ). Поэтому пакеты программ должны быть такими, чтобы к их помощи могли прибегнуть не только математики, но и специалисты дру­гих сфер научной деятельности, прошедшие сравнительно небольшой курс математического обу­чения.

ППП - это активное концентрированное выражение опыта, приобретённого в вычисли­тельном эксперименте.

**7. Заключение.**

Вычислительный эксперимент начинается тогда, когда в результате натурного эксперимен­та получено достаточно данных для построения математической модели исследуемого объекта. Обычно построенная математическая модель оказывается настолько сложной, что требуется соз­давать не только уникальное программное обеспечение для воспроизведения ее на вычислитель­ной машине, но и новые численные методы, чтобы найти решение в приемлемые сроки и с необ­ходимой точностью. Сложность первоначальных моделей обусловлена прежде всего тем, что на ранних этапах исследования нет данных, позволяющих провести ее упрощение. На практике все­гда исследуется иерархия моделей различной сложности, определяются границы их применимо­сти и допустимость тех или иных упрощений. Построенная программная реализация математиче­ской модели используется для изучения законов поведения объектов, испытаний различных ре­жимов работы, построения управляющих воздействий, поиска оптимальных характеристик. На основании изучения поведения модели либо делается вывод о возможности ее применения для практических нужд, либо принимается решение о проведении дополнительной серии натурных экспериментов и корректировки модели, и тогда весь цикл исследований приходится повторять с начала.

Сложность и своеобразие этого вида научных исследований позволяет ставить вопрос о появлении новых наук: вычислительной информатики, вычислительной физики...

**8. Список использованной литературы:**

1. Н.М. Охлопков, Г.Н. Охлопков. “Введение в специальность “Прикладная Математика””. Часть первая. Якутск 1997.
2. Авт. Пред. - А.А. Самарский. “Компьютеры, модели, вычислительный эксперимент”. Москва “Наука” 1988.
3. Ю. Сениченков. “Три урока по теме “Математическое моделирование и вычислительный эксперимент” с помощью Model Vision”.
4. Н.А. Пахомова. “Методика формирования понятия “Вычислительный эксперимент””.
5. Под общей редакцией Д.А. Поспелова. “Информатика - энциклопедический словарь для начинающих”. Москва 1994.

1. Численный эксперимент потребовал создания специфических методов вычислений. В ча­стности возникла необходимость в решении таких систем, где коэффициенты членов уравнений различаются на десятки порядков. [↑](#footnote-ref-1)
2. Программное обеспечение, позволяющее автоматизировать основные операции вычислительного эксперимента, называют пакетами прикладных программ или программными комплексами для автоматизации вычислительного эксперимента. [↑](#footnote-ref-2)
3. Имеется в виду используемые при вычислительном эксперименте - Пакеты Прикладных Программ. Которые ранее упоминались в пункте 3.( Основные этапы вычислительного эксперимента ). [↑](#footnote-ref-3)