

УДК 004:37

ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ ТА ЙОГО ГРАФІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Дубовик М.О.

Херсонський державний університет

Стаття пояснює читачу, що таке «обчислювальний експеримент», та дає основні визначення цього поняття. Також стаття має практичне застосування, тому що розповідає як і за яких умов краще використовувати обчислювальний експеримент та графічне моделювання, як один із засобів відображення процесу або явища, що має наукову важливість і має вивчатися.

***Ключові слова.** Обчислювальний, чисельний, експеримент, процес, явище, моделювання, модель, спостереження, графічний, наочний.*

Обчислювальний експеримент

Наукове дослідження реального процесу можна проводити теоретично або експериментально. Ці обидва види дослідження проводяться незалежно один від одного. Такий шлях пізнання істини носить однобічний характер. У сучасних умовах розвитку науки та техніки намагаються проводити комплексне вивчення об'єкта. Цього можна досягти за допомогою нової методології та технології наукових досліджень, що задовольняють вимогам часу.

Широке застосування ОЕМ у математичному моделюванні, достатньо потужна теоретична та експериментальна база дозволяють говорити про обчислювальний експеримент, як про нову технологію та методологію в наукових та прикладних дослідженнях.

Визначення поняття «Обчислювальний експеримент»

Обчислювальний експеримент – це експеримент над математичною моделлю об'єкта на ЕОМ, який полягає в тому, що за одними параметрами моделі обчислюються інші її параметри і на цій основі робляться висновки про властивості явища, що описується математичною моделлю.

У проведенні обчислювального експерименту бере участь колектив дослідників – фахівці з конкретної предметної області, математики теоретики, обчислювачі, прикладники, програмісти. Це пов'язано з тим, що моделювання реальних об'єктів на ЕОМ включає в себе великий обсяг робіт з дослідження їх фізичної та математичної моделей, обчислювальних алгоритмів, програмування та обробку результатів. Тут можна помітити аналогію з роботами з проведення натурних експериментів: складання програми експериментів, створення експериментальної установки, виконання контрольних експериментів, проведення серійних дослідів, обробки експериментальних даних та їх інтерпретація і т.д. Таким чином, проведення великих комплексних розрахунків слід розглядати як експеримент, проведений на ЕОМ чи обчислювальний експеримент.

Обчислювальний експеримент має те ж значення, що і звичайний експеримент у дослідженні нових гіпотез. Сучасна гіпотеза майже завжди має математичний опис, над яким можна виконувати експерименти.

При введенні цього поняття слід особливо виділити здатність комп'ютера виконувати великий обсяг обчислень, що реалізують математичні дослідження. Інакше кажучи, комп'ютер дозволяє зробити заміну фізичного, хімічного і т.д. експерименту експериментом обчислювальним.

При проведенні обчислювального експерименту можна переконатися в необхідності та корисності останнього, особливо у випадках, коли провести натуральний експеримент важко або неможливо. Обчислювальний експеримент, в порівнянні з натурним, значно

дешевше і доступніше, його підготовка і проведення потребує меншого часу, його легко переробляти, він дає більш детальну інформацію. Крім того, в ході обчислювального експерименту виявляються межі застосування математичної моделі, які дозволяють прогнозувати експеримент у природних умовах. Тому використання обчислювального експерименту обмежується тими математичними моделями, які беруть участь в проведенні дослідження. З цієї причини обчислювальний експеримент не може замінити повністю експеримент натурний та вихід з цього становища полягає в їх розумному поєднанні. У цьому випадку у проведенні складного експерименту використовується широкий спектр математичних моделей: прямі завдання, обернені задачі, оптимізовані завдання та завдання ідентифікації.

Використання обчислювального експерименту як засобу вирішення складних прикладних проблем має у випадку кожної конкретної задачі і кожного конкретного наукового колективу свої специфічні особливості. І тим не менше, завжди чітко проглядаються спільні характерні основні риси, що дозволяють говорити про єдину структуру цього процесу. У наш час, технологічний цикл обчислювального експерименту прийнято підрозділяти на ряд технологічних етапів. І хоча такий розподіл значною мірою умовний, тим не менше він дозволяє краще зрозуміти сутність цього методу проведення теоретичних досліджень.

Основні етапи обчислювального експерименту

У загальному випадку, основні етапи вирішення задачі із застосуванням ЕОМ можна розглядати як один технологічний цикл обчислювального експерименту. А взагалі, обчислювальний експеримент як нова методика дослідження "відбувся" після того, як вдалося на кожному з етапів традиційної ланцюжка ефективно використовувати обчислювальну машину.

Усі етапи технологічного циклу обчислювального експерименту тісно пов'язані між собою і призначені для отримання з заданою точністю за короткий час адекватного кількісного опису поведінки досліджуваного реального об'єкта в тих чи інших умовах. Тому всі етапи технологічного циклу повинні бути однаково міцними. Слабкість в одній ланці спричиняє за собою слабкість в інших ланках технології.

Основні етапи обчислювального експерименту:

- Проведення натурального експерименту
- Побудова математичної моделі
- Вибір і застосування чисельного методу для знаходження рішення
- Обробка результатів обчислень
- Порівняння з результатами натурального експерименту
- Прийняття рішення про продовження натурних експериментів
- Продовження натурального експерименту для отримання даних, необхідних для уточнення моделі

- Накопичення експериментальних даних
- Побудова математичної моделі
- Автоматична побудова програмної реалізації математичної моделі
- Автоматизоване знаходження чисельного рішення
- Автоматизоване перетворення обчислювальних результатів у форму, зручну для аналізу

- Прийняття рішення про продовження натурних експериментів

У найбільш загальному вигляді етапи обчислювального експерименту можна представити у вигляді послідовності технологічних операцій (вони реалізовані у відповідних блоках програмного комплексу):

- Побудова математичної моделі
- Перетворення математичної моделі
- Планування обчислювального експерименту

- Побудова програмної реалізації математичної моделі
- Налаштування і тестування програмної реалізації
- Проведення обчислювального експерименту
- Документування експерименту

Для проведення великомасштабних наукових досліджень використовується модульна технологія, заснована на модульному поданні:

- Математичних моделей
- Обчислювальних алгоритмів
- Програм для ЕОМ
- Технічних засобів

Складання програм із модулів проводиться автоматично, за допомогою спеціальної програми. Створюються програмні комплекси і проблемно-орієнтовані пакети прикладних програм багаточислового призначення. Характерна особливість пакетів полягає в можливості постійного розвитку, розширення завдяки включенню нових модулів, що реалізують нові можливості. Слід зазначити, що один і той же пакет прикладних програм може бути використаний в обчислювальних експериментах для досліджень різних реальних об'єктів.

Сфери застосування обчислювального експерименту

У сучасній науці і техніці з'являється все більше областей, завдання в яких можна і потрібно вирішувати методом обчислювального експерименту, за допомогою математичного моделювання. Звернемо увагу на деякі з них.

Енергетична проблема. Прогнозування атомних і термоядерних реакторів на основі детального математичного моделювання процесів, які в них стаються. У цій області робота ведеться дуже успішно. Обчислювальний експеримент тісно пов'язаний з натурним експериментом і допомагає, замінює і здешевлює весь дослідницький цикл, істотно його прискорюючи.

Космічна техніка. Розрахунок траєкторій літальних апаратів, завдання обтікання, системи автоматичного проектування. Обробка даних натурального експерименту, наприклад радіолокаційних даних, зображень зі супутників, діагностика плазми. Тут дуже важливою виявляється проблема підвищення якості приладів, і зокрема вимірювальної апаратури. Між тим, в даний час показано, що, використовуючи вимірювальний прилад середньої якості і приєднавши до нього ЕОМ, можна на основі спеціальних алгоритмів отримати результати, які дав би вимірювальний прилад дуже високої якості. Таким чином, поєднання вимірювального приладу з комп'ютером відкриває нові можливості.

Технологічні процеси. Одержання кристалів і плівок, які, до речі, потрібні для створення обчислювальної техніки, для вирішення проблем в галузі елементарної бази (що неможливо без математичного моделювання); моделювання теплового режиму конструктивних вузлів перспективних ЕОМ, процесів лазерної плазми, технології створення матеріалів із заданими властивостями (це одне з основних завдань будь-якої технології).

Екологічні проблеми. Питання прогнозування та управління екологічними системами можуть вирішуватися лише на основі математичного моделювання, оскільки ці системи існують в "єдиному екземплярі".

Гео- і астрофізичні явища. Моделювання клімату, довгостроковий прогноз погоди, землетрусів і цунамі, моделювання розвитку зірок і сонячної активності, фундаментальні проблеми походження і розвитку Всесвіту.

Хімія. Розрахунок хімічних реакцій, визначення їх констант, дослідження хімічних процесів на макро- та мікрорівні для інтенсифікації хімічної технології.

Біологія. Особливо слід відзначити інтерес до математичного моделювання у зв'язку з вивченням фундаментальних проблем цієї науки (генетики, морфогенезу) і розробкою нових методів біотехнології.

Класичною областю математичного моделювання є фізика. До недавнього часу в фізиці мікросвіту (у квантовій теорії поля) обчислювальний експеримент не застосовувався,

так як було прийнято використовувати метод малого параметра, таким є стала тонкої структури. Однак зараз фізики-теоретики прийшли до висновку, що процеси в мікросвіті сильно нелінійні, і тому необхідно переходити до чисельних методів, і для цієї мети навіть розробляються спеціальні комп'ютери.

Аналіз математичних моделей за допомогою обчислювального експерименту з кожним роком завойовує нові позиції. У 1982 р. Нобелівська премія з фізики була присуджена К. Вільсону, який запропонував ряд фундаментальних моделей в теорії елементарних частинок і критичних явищ, які необхідно досліджувати чисельно. У 1979 р. Нобелівською премією з медицини була удостоєна робота в області обчислювальної томографії (відновлення об'ємного предмета по набору його перерізів). У 1982 році Нобелівською премією з хімії відзначено роботу, в якому методами обчислювальної томографії відновлювалася структура вірусу за даними електронної мікроскопії.

Кожна з цих робіт призводить до постановки глибоких математичних завдань, для вирішення яких необхідний обчислювальний експеримент. При постановці обчислювального експерименту в різних областях використовуються пакети спеціалізованих прикладних програм.

Застосування графічних моделей в організації обчислювального експерименту

Звичайно ж, сучасним інструментом для інформаційного моделювання є комп'ютер. На комп'ютері можна писати тексти (будувати вербальні моделі), малювати карти і схеми (графічні моделі), будувати таблиці (табличні моделі). Але при такому використанні комп'ютера в моделюванні його можливості проявляється не в повній мірі.

Головна перевага комп'ютера перед людиною – здатність до швидкого обчислення. Сучасні комп'ютери обчислюють зі швидкостями в сотні тисяч, мільйони і навіть мільярди операцій за секунду!

Враховуючи, що розрахунки проводяться над багатозначними числами (10-20 десяткових цифр), обчислювальні здібності людини не можна навіть порівнювати з комп'ютерними. Ці феноменальні обчислювальні можливості проявляється, перш за все, в комп'ютерному математичному моделюванні або в відтворенні обчислювального експерименту.

Багато процесів, що відбуваються в природі, в техніці, в економічних і соціальних системах, описуються складними математичними співвідношеннями. Це можуть бути рівняння, системи рівнянь, системи нерівностей тощо, які є математичними моделями описуваних процесів. І відтворення таких процесів є не інакше як створення відповідної математичної задачі з заданими умовами, співвідношеннями та властивостями і моделюванням математичного (чисельного) експерименту.

У такому експерименті, математична модель є лише описом модельованого процесу на мові математики. Звичайно ж, дійсний (існуючий насправді) процес не зазнає впливу або втручання.

Обчислювальний експеримент у деяких випадках може замінити реальний фізичний експеримент.

Вражаючий приклад використання такої можливості – припинення випробувань ядерної зброї, які супроводжувалися значним екологічним збитком. Завдяки дуже точним математичним моделям і потужним комп'ютерам стало можливо прорахувати всі наслідки, до яких призводить зміна в конструкції ядерної бомби. Образно кажучи, вдалося «підірвати бомбу» всередині комп'ютера, нічого не зруйнувавши.

Важливою властивістю комп'ютерних математичних моделей є можливість візуалізації результатів розрахунків. Цим цілям служить використання комп'ютерної графіки.

Представлення результатів у наочному вигляді – найважливіша умова для їх кращого розуміння. Наприклад, результати розрахунків розподілу температури в деякому об'єкті представляються у вигляді його різнобарвного зображення: ділянки з найвищою температурою забарвлюються в червоний колір, а в самій холодній – у синій. Ділянки з проміжними значеннями температури фарбуються в кольори спектру, рівномірно переходять від червоного до синього.

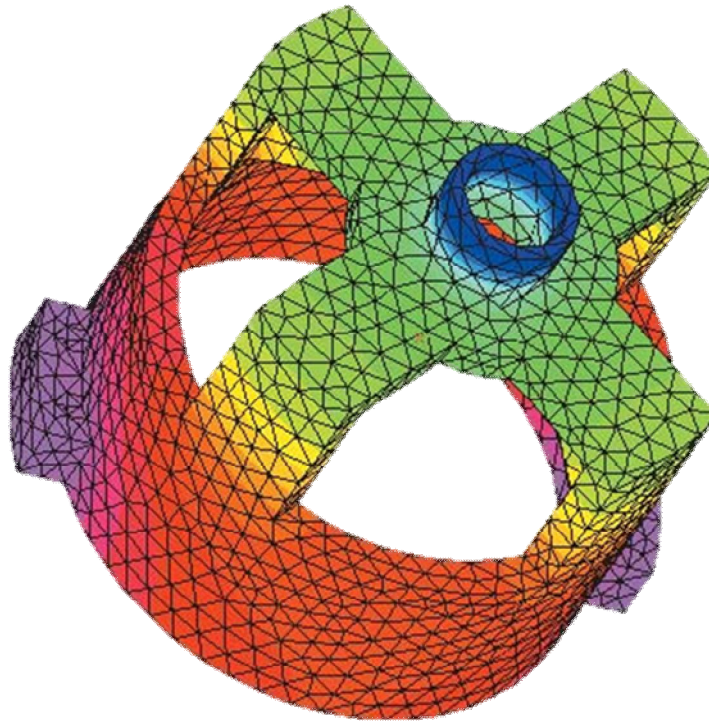


Рис. 2. Розрахунок розподілу температури в об'єкті

Для зображення динамічних результатів (таких, що змінюються з часом) використовують графічну анімацію.

Комп'ютерна графіка дозволяє людині в процесі проведення обчислювального експерименту «заглянути» в недоступні місця досліджуваного об'єкта. Можна отримати зображення будь-якого перетину об'єкта складної форми з відображенням характеристик, що розраховуються: температурних полів, тиску та ін. У реальному фізичному експерименті таке можна зробити далеко не завжди. Наприклад, неможливо виконати вимірювання всередині доменної печі, що працює або всередині зірки. А на моделі це зробити можливо.

Є багато прикладів застосування графічного моделювання на практиці, наприклад, одним з таких є імітаційне графічне моделювання – особливий різновид графічного моделювання на комп'ютері.

Імітаційна модель відтворює поведінку складної системи, елементи якої можуть вести себе випадковим чином. Інакше кажучи, поведінка яких заздалегідь передбачити не можна.

Така поведінка в математиці називається стохастичною. З курсу фізики відоме явище броунівського руху: хаотичного переміщення легких частинок на поверхні рідини з-за нерівномірних ударів молекул з різних сторін. Не можна точно розрахувати траєкторію броунівської частинки, але її можна зімітувати на екрані комп'ютера. Звідси і походить назва – імітаційна модель.

До імітаційних моделей належать моделі систем масового обслуговування: наприклад, системи торгівлі, автосервісу, швидкої допомоги, в яких поява заявок на обслуговування і тривалість обслуговування однієї заявки – події випадкові.

Завдання, які вирішуються за допомогою імітаційних моделей систем масового обслуговування, полягають у пошуку режимів роботи служб сервісу (магазинів, автозаправок тощо), що зменшують час очікування клієнтів.

Ще одним популярним об'єктом для імітаційного моделювання є транспортні системи: мережа міських доріг, перехрестя, світлофори, автомобілі.

Модель імітує рух транспортних потоків по міських вулицях. Експерименти на такій моделі дозволяють знайти режими управління рухом (робота світлофорів), що зменшують можливість виникнення заторів. Робота імітаційної моделі завжди візуалізується на екрані комп'ютера.

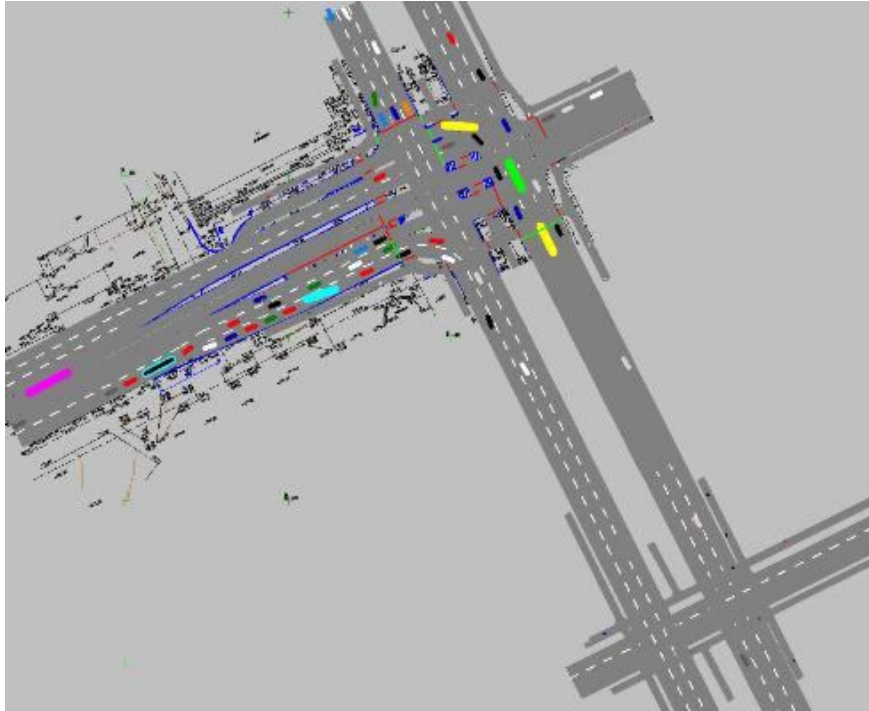


Рис. 3. Моделювання дорожнього руху

На основі чисельного моделювання та теоретичних розрахунків була виведена та доведена теорія, що на стадії формування газового акреційного диска в тісній подвійній системі зірок у ньому виникає особливість у радіальному розподілі питомого кутового моменту (і кугової швидкості обертання) – плавний злам у внутрішній області диска. Це призводить до розвитку нестійкості збільшеного відображення і збудження в диску спектру великомасштабних спіральних хвильових структур, серед яких домінує основна – однорукавна спіральна гармоніка.

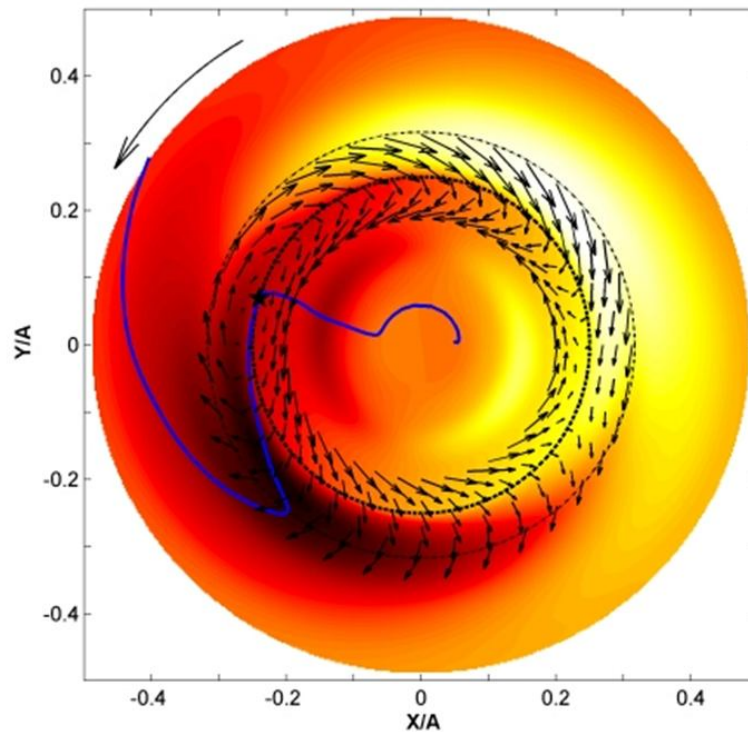


Рис. 4. Формування газового акреційного диска в тісній подвійній системі зірок

Найяскравішим прикладом серед моделей «квазіексперименту» є задача N тіл. Як відомо, аналітично вона не вирішується, тому астрономам залишається покладатися тільки на моделювання. Спеціально для цього навіть будують суперкомп'ютери. Наприклад, GRAPE 4 (GRAVityPipE 4) у Токіо призначений для моделювання процесу формування галактик. Постановка експерименту така: область простору, обмежена сферою радіусом 2 мегапарсек, в якій знаходяться 786 тисяч частинок, кожна масою близько 4×10^6 сонячних мас. Гравітаційна сила в цьому випадку є домінуючою, тому і використовується алгоритм N тіл. Роздільна здатність експерименту – 140 парсеків. Завдання в такій постановці дає можливість змоделювати флуктуацію щільності в просторі з рівномірним розподілом маси і простежити процес формування об'єктів типу скупчення галактик. На основі алгоритму N тіл вирішується і завдання моделювання злиття галактик.

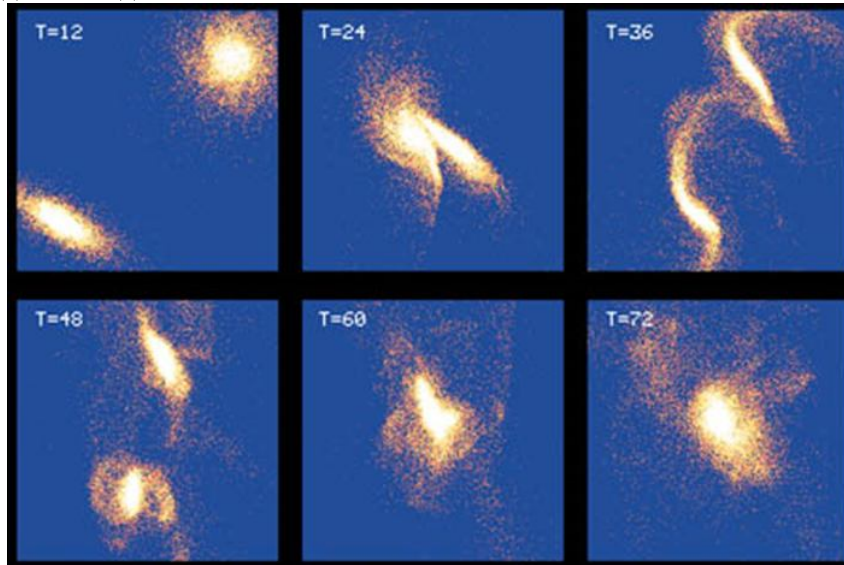


Рис. 5. Моделювання процесу формування галактик

Інший тип задач, у яких визначальну роль відіграє комп'ютерний експеримент із використанням графічного відтворення, це моделювання процесів, недоступних прямому спостереженню через надзвичайно швидке або занадто повільне протікання. До перших належить, наприклад, злиття нейтронних зірок, що триває близько 10 мс. Масивні компактні об'єкти (нейтронні зірки, чорні діри), обертаючись з шаленою швидкістю, випромінюють гравітаційні хвилі. Моделі подвійних систем дозволяють оцінити ці досить тонкі ефекти «брижі» простору-часу і розрахувати чутливість приладів для їх спостереження (проекти LISA, LIGO 2).

Процес, що повільно протікає, теж не можна спостерігати безпосередньо: злиття двох галактик займає десятки мільйонів років, а еволюція їх скупчення – ще більше. Але вже Pentium 200МГц дозволяє спостерігати ці явища, витративши на розрахунки всього кілька місяців. Правда, для цього доведеться прийняти кілька припущень, наприклад, те, що галактики – це матеріальні точки, які зливаються згідно закону, при якому ймовірність злиття галактик нелінійно залежить від їх мас.

Висновки

Таким чином, здійснивши аналіз сьогоденної потреби в наочному представленні обчислювального експерименту та зрозумілому поданні інформації, можна зробити висновок, що сьогодення не може існувати без графічного моделювання. Тим паче, що графічна модель, на відміну від реального процесу та явища, має безліч плюсів. Це й можливість імітації в прискореному або сповільненому режимі, й безпечні та антикатастрофічні для людства наслідки моделювання, й можливість корегування подій експерименту.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

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.
6. Центр дорожной информации, <http://road.perm.ru/>
7. Информатика и ИКТ, <http://www.5byte.ru/>