Lekce 1
Modelování a simulace

Osnova

1. Matematický model
2. Příklady matematických modelů
3. Metody řešení
4. Numerické metody
5. Využití počítačů
6. Simulace

Matematický model

je

- **teoretický prostředek pro kvantitativní popis (reálného) studovaného systému**

Tento popis je ovšem vždy přibližný!

- idealizace objektů (hmotný bod)
- přibližný popis interakcí (chyby měření, pozorování apod.)
- zanedbání „nevýznamných" efektů (redukcionismus)

zahrnuje

- **popis stavu**
- **popis odezvy („materiálové" rovnice)**
- **zadání materiálových parametrů**
- **popis časového vývoje (evoluční rovnice), zadání podmínek rovnováhy apod.**

Příklady matematických modelů

Soustava hmotných bodů – klasický mechanický popis

stav

$$\vec{r}_1 = [x_1, y_1, z_1],\ \vec{r}_2 = [x_2, y_2, z_2],\ \ldots,\ \vec{r}_N = [x_N, y_N, z_N]$$

$$\vec{p}_1 = [p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}],\ \vec{p}_2 = [p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}],\ \ldots,\ \vec{p}_N = [p_{Nx}, p_{Ny}, p_{Nz}]$$

materiálové parametry

hmotnosti, náboje, interakční konstanty apod.

odezva

$$E = \sum_{K=1}^{N} \frac{\vec{p}_K^{\,2}}{2m_K} + V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N),\quad \vec{F} = -\nabla V \quad \text{apod.}$$

časový vývoj

$$\dot{\vec{r}}_1 = \frac{\vec{p}_1}{m_1},\ \dot{\vec{p}}_1 = -\nabla V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$$

$$\ldots$$

$$\dot{\vec{r}}_N = \frac{\vec{p}_N}{m_N},\ \dot{\vec{p}}_N = -\nabla V(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$$

Příklady matematických modelů

Soustava hmotných bodů – statistický popis termodynamické rovnováhy

stav

$\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N; \quad \vec{p}_1,\dots,\vec{p}_N$ (mikrostav)

T, V, N (makrostav)

materiálové parametry

hmotnosti, náboje, interakční konstanty apod.

odezva

$$U = \frac{\int H(\vec{p}_K,\vec{r}_K)\,\rho(\vec{p}_K,\vec{r}_K)\,\mathrm{d}^3\vec{p}_K\mathrm{d}^3\vec{r}_K}{\int \rho(\vec{p}_K,\vec{r}_K)\,\mathrm{d}^3\vec{p}_K\mathrm{d}^3\vec{r}_K}$$ apod.

podmínky rovnováhy

$$\rho(\vec{p}_K,\vec{r}_K) = e^{-\frac{H(\vec{p}_K,\vec{r}_K)}{k_B T}}$$

Příklady matematických modelů

Homogenní chemický reaktor

stav	$c_1, \ldots, c_n$	(koncentrace látek)
	T, P	(teplota, tlak)
materiálové parametry	stechiometrické koeficienty, rychlostní konstanty	
odezva	reakční rychlosti $f_i(c_1, \ldots, c_n; T, P)$	

časový vývoj

$$\dot{c}_1 = f_1(c_1, \ldots, c_n, T, P)$$
$$\ldots$$
$$\dot{c}_n = f_n(c_1, \ldots, c_n, T, P)$$

Příklady matematických modelů

Difúze

stav	$c(\vec{r})$	(rozložení koncentrace látky v prostoru)
materiálové parametry	D	(koeficient difúze)
odezva	$\vec{j} = \vec{J}[c] = -D\nabla c$	(difúzní tok)
časový vývoj	$\dfrac{\partial c}{\partial t} + D\Delta c = 0$	& okrajové podmínky
podmínka rovnováhy	$\Delta c = 0$	& okrajové podmínky

Metody řešení

Matematický model (obvykle) používáme k nalezení časové závislosti stavových a dalších veličin, stacionárních stavů, hodnot funkcí odezvy apod.

Matematicky to znamená

- řešit soustavy rovnic
  - obyčejných diferenciálních
  - parciálních diferenciální
  - integro – diferenciálních
  - nelineárních (nediferenciálních)
- počítat mnohonásobné integrály
- hledat extrémy funkcí mnoha proměnných
- atd. atd.

Numerické metody

Toto řešení je možné v analyticky uzavřeném tvaru pouze pro nejjednodušší modely:

- problém dvou částic
- ideální plyn, ideální krystal
- jednoduché chemické reaktory s malým počtem reaktantů a meziproduktů
- problém dvou částic
- difúze s vysokým stupněm symetrie okrajových a počátečních podmínek

Obvykle se musíme uchýlit k metodám numerické matematiky:

- tj. numerickými metodami hledáme přibližné, leč dostatečně přesné řešení

Problémy:

- numerická náročnost (mnoho numerických výpočtů)
- omezená numerická přesnost
- možné numerické nestability

Využití počítačů

netriviální model + numerická metoda $\Rightarrow$ **obrovské výpočetní nároky** $\Rightarrow$ **nutno použít počítač a sofistikovaný software**

Počítač

- osobní (PC)
- pracovní stanice
- superpočítače

Software

- cizí
  - speciální
  - matematický, statistický
  - grafický
  - kompilátory programovacích jazyků
- vlastní programy

Doporučená literatura

M. M. WOOLFSON, G. J. PERT
An Introduction to Computer Simulation, kap. 1
Oxford University Press, New York 1999

G. FULFORD, P. FORRESTER, A. JONES
Modelling with Differential and Difference Equations, kap. 1
Cambridge University Press, Cambridge 1997

I. NEZBEDA, J. KOLAFA, M. KOTRLA
Úvod do počítačových simulací, kap. 1
Karolinum, Praha 2003