

Министерство образования и науки Российской Федерации

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

**Л.А. Конопелько, В.В. Растоскуев,
М.А. Кустикова, С.А. Банарь, Е.А. Быковская,
А.С. Маюрова**

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ТЕХНОСФЕРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

РЕКОМЕНДОВАНО К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ В УНИВЕРСИТЕТЕ ИТМО

по направлению подготовки (специальности)

20.04.01 Техносферная безопасность

в качестве учебно-методического пособия для реализации основных
профессиональных образовательных программ высшего образования
(магистратуры, специалитета)

 УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Санкт-Петербург

2018

Конопелько Л.А., Растоскуев В.В., Кустикова М.А., Банарь С.А., Быковская Е.А., Маюрова А.С., Математическое моделирование в техносферной безопасности. – СПб: Университет ИТМО, 2018. – 65 с.

Рецензенты: Пинчук О.А., к.т.н., доцент факультета низкотемпературной энергетики Университет ИТМО

Учебно-методическое пособие включает теоретический материал по дисциплине «Математическое моделирование для анализа пространственной информации», методические указания к самостоятельной работе студента. Предназначено для обучения магистрантов, изучающих основы информационных технологий в области техносферной безопасности, а также для выработки у них практических навыков использования открытой системы SciLAB. Освоение предложенного материала учащимися позволит им приобрести необходимые знания и навыки для решения широкого круга задач техносферной безопасности.



Университет ИТМО – ведущий вуз России в области информационных и фотонных технологий, один из немногих российских вузов, получивших в 2009 году статус национального исследовательского университета. С 2013 года Университет ИТМО – участник программы повышения конкурентоспособности российских университетов среди ведущих мировых научно-образовательных центров, известной как проект «5 в 100». Цель Университета ИТМО – становление исследовательского университета мирового уровня, предпринимательского по типу, ориентированного на интернационализацию всех направлений деятельности.

© Университет ИТМО, 2018

© Конопелько Л.А., Растоскуев В.В., Кустикова М.А., Банарь С.А.,
Быковская Е.А., Маюрова А.С., 2018

Содержание

Введение	4
1. Математическое моделирование в техносферной безопасности	5
1.1. Риск и техносферный риск	-
1.2. Модели в науке и технике	11
1.3. Системный подход к моделированию	13
2. Математические модели на основе дифференциальных уравнений .	17
2.1. Введение в SciLAB	-
2.2. Модели с отрицательными и положительными обратными связями	20
2.3. Модели, основанные на нелинейных дифференциальных уравнениях	29
3. Статистические модели	36
3.1. Использование статистики при моделировании систем	-
3.2. Линейный регрессионный анализ	46
3.3. Нелинейный регрессионный анализ	56
Список использованных источников.	63

Введение

Настоящее учебное пособие разработано в соответствии с общей характеристикой магистерской программы «Информационные системы для техносферной и экологической безопасности», включает теоретический материал по дисциплине «Математическое моделирование для анализа пространственной информации» и ориентировано на желающих получить базовую информацию о моделировании систем техносферной безопасности для поддержки принятия решений. В пособии изложены ключевые сведения о решении прямых и обратных задач, возникающих при обработке данных техносферной безопасности. Это позволяет получить представление об источниках данных для рассматриваемых систем, об особенностях их анализа и применения его результатов.

Дисциплина «Математическое моделирование для анализа пространственной информации» нацелена на формирование общепрофессиональной компетенции (Basic Professional Skills) ОПК-1: способен представлять современную научную картину мира, выявлять естественнонаучную сущность, определять пути решения проблем своей профессиональной деятельности, в том числе с использованием методов математического моделирования, и оценивать эффективность сделанного выбора. Что подтверждается умением применять пакеты прикладных программ для анализа количественной информации, знанием проблем и перспектив использования результатов моделирования различных процессов в науках о Земле.

Данное пособие рассчитано на начинающих пользователей открытой системы SciLAB, уверенно владеющих персональным компьютером, и предназначена для того, чтобы помочь им в освоении приемов работы в SciLAB при моделировании процессов в техносферной безопасности.

Актуальность данного пособия обусловлена необходимостью издания учебных пособий, соответствующих программным требованиям для магистров, именно поэтому пособие содержит достаточное количество заданий для внеаудиторных занятий. Компетенции, получаемые студентами, полностью соответствуют ОС Университета ИТМО.

1. Математическое моделирование в техносферной безопасности

1.1. Риск и техносферный риск

В соответствии с ГОСТ Р 22.0.05-94 **промышленная безопасность** в чрезвычайных ситуациях определяется как "состояние защищенности населения, производственного персонала, объектов народного хозяйства и окружающей природной среды от опасностей, возникающих при промышленных авариях и катастрофах в зонах чрезвычайной ситуации". Количественной мерой защищенности служит **техногенный риск**, который определяется как вероятность события, имеющего неблагоприятные последствия.

Вероятностью события называется оценка возможности появления этого события в результате опыта. Существует строгая математическая теория вероятности, сформулированная А. Н. Колмогоровым. Однако для практических целей обычно пользуются интуитивно понятным определением вероятности P через отношение: $P = n/N$, где n — число появления события, N — общее число опытов. Например, если монетку подбросить 100 раз (N) и в 49 случаях (n) выпадет решка, то вероятность можно оценить так: $P = 49/100 = 0,49$. Если продолжать подбрасывать монетку, то отношение n/N все ближе будет приближаться к теоретическому значению вероятности 0,5 (закон больших чисел).

Неблагоприятный исход — это любое совершившееся событие, причиняющее вред (финансовый, информационный, вред здоровью человека и т. п.). Если вероятность наступления неблагоприятного события заметно больше нуля, говорят об **опасности**. В качестве синонима термину «опасность» используется слово «угроза», хотя иногда последним термином обозначают события с малой вероятностью неблагоприятного исхода. Наступление неблагоприятного события не всегда приводит к тяжелым последствиям, независимо от того, к чему относится воздействие (человек, устройство, техническая система и т. п.). Чем легче при воздействии наступают неблагоприятные последствия, тем больше **уязвимость** объекта.

Оценка риска направлена на выявление и количественное описание рисков. Основным результатом этой процедуры должны быть количественные оценки вероятностей неблагоприятных исходов.

Следует обратить внимание, что оценка техногенного риска как вероятности в определении, приведенном выше, не дает исчерпывающего представления о возможных неблагоприятных последствиях для населения, производственного персонала и т. п., так как при одном и том же значении экологического риска последствия будут тем значительней, чем больше приносимый **ущерб**, т. е. вред, приносимый объектам народного хозяйства и людям. Ущерб обычно оценивается в денежной форме - в рублях, долларах и т. п. Легко представить, что событие, которое практически наверняка наступит (риск близок к единице) при ущербе в 1 копейку, менее опасно, чем событие маловероятное, но сопровождающееся огромным ущербом (например, авария на атомной станции). Поэтому для оценки вероятного ущерба природной среде и человеку формула для экологического ущерба расширяется следующим образом:

$$R_c = C \cdot R \quad (1.1)$$

где: R_c - экологический ущерб, C - величина прогнозируемого ущерба (обычно в стоимостном выражении), R - экологический риск (вероятность события, вызывающего ущерб C).

Такое определение используется в большинстве научных исследований в области риска.

Величину риска предлагается [Измалков В.И., Измалков А.В., 1998] представить, как произведение трех компонент:

$$R = R_1 \cdot R_2 \cdot R_3 \quad (1.2)$$

где: R_1 - вероятность возникновения события или явления, обуславливающего формирование и действие вредных факторов;

R_2 - вероятность формирования определенных уровней физических полей, ударных нагрузок, полей концентрации вредных веществ в различных средах и их дозовых нагрузок, воздействующих на людей и другие объекты биосферы;

R_3 - вероятность того, что указанные выше уровни полей и нагрузок приведут к определенному ущербу (уязвимость).

Представление риска как произведения трех составляющих предполагает возможность отдельной оценки этих составляющих. Это важно для управления риском, т. к. не на все составляющие в формуле (1.2) можно эффективно влиять. Например, при оценке риска чрезвычайной ситуации на атомной станции первая составляющая плохо поддается оценке. Проводимая оценка надежности атомной станции основывается на известных свойствах техногенной системы, а наиболее тяжелые аварии происходят из-за непредусмотренных особенностей таких, как неправильные действия операторов. Вторая составляющая риска (формула 1.2), зависящая главным образом от распространения радиоактивного облака, моделируется значительно точнее, и эвакуацию людей из опасной зоны можно провести в соответствии с просчитанными сценариями развития чрезвычайной ситуации. Третья составляющая зависит от многих факторов (эффективность средств защиты, размеры санитарной зоны и т. п.) и может быть уменьшена при выполнении требований техники безопасности. Уменьшая в данном случае составляющие R_2 и R_3 в формуле (1.2), можно уменьшить риск R и довести его до приемлемых значений.

Риски в жизни человека. Как справедливо отмечал Воланд, человек "...не может ручаться даже за свой собственный завтрашний день". Соответственно, любой миг жизни человека сопряжен с риском. Согласно статистическим данным [Евстафьев И.Б., Григорьев С.Г., 1993], в 1990 г. в СССР погибло 143865 человек. Исходя из того, что в 1990 г. в СССР по данным статистики проживало 288624 тыс. человек, средняя частота гибели составляла $5 \cdot 10^{-4}$, т. е. погибло 5 человек из каждых 10000. Учитывая большой объем выборки, частоту обычно приравнивают к вероятности, т. е.:

$$P = n/N \quad (1.3)$$

где, P - вероятность гибели человека за год (индивидуальный риск), n - число погибших за год, N - численность населения на данной территории.

Исходя из этого, можно утверждать, что вероятность гибели отдельного человека (**индивидуальный риск**) в СССР в 1990 г. составляла $5 \cdot 10^{-4}$. В действительности вероятность гибели была больше, т. к. в вышеприведенных статистических данных не учитываются многие причины неестественной смерти - пищевые отравления, самоубийства, несчастные случаи в походах и т. п. **Коллективный риск** (групповой, социальный, популяционный) — это риск проявления опасности для определённой социальной или профессиональной группы людей. К этому типу риска относится, например, риск профессии шахтера или риски, связанные с производственными заболеваниями. В Российской Федерации (РФ) смертность от всех неестественных причин в 1990 г. составляла 250 тыс. человек. Учитывая это и численность населения в РФ в 1990 г. 148041 тыс. человек, риск смерти в РФ в этом году составлял $1.7 \cdot 10^{-3}$. Анализ статистических данных позволяет сделать вывод о том, что фоновый уровень индивидуального риска в РФ близок к $1 \cdot 10^{-3}$.

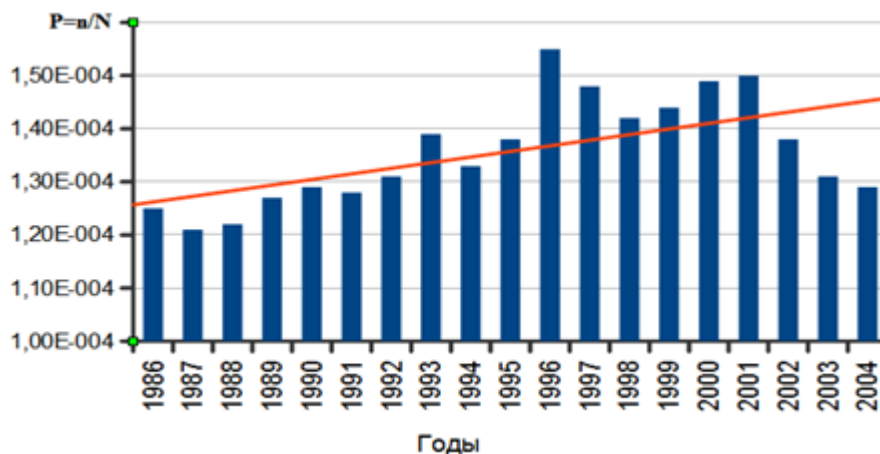


Рис. 1.1. Вероятность гибели в техногенных ЧС в Российской Федерации

Представляется интересным рассмотреть риски, связанные с техногенными чрезвычайными ситуациями (ЧС). На рис. 1.1 приведены аналогичные данные, характеризующие вероятность гибели в техногенных ЧС. Данные скомпонованы на основе информации из двух публикаций [Акимов В. А. и др., 2002; Самсонов А. Ю., 2006]. Линия сглаживания на рис. 1.1 показывает, что риск гибели в техногенных ЧС (индивидуальный риск) в Российской Федерации увеличивается, хотя, анализируя данные рис 1.1, к этому выводу следует относиться с осторожностью.

Следует также обратить внимание на то, что по числу случаев травматизма со смертельным исходом Россия заметно отличается от экономически развитых страна (1996), о чем свидетельствует рисунок 1.2. [Акимов В. А. и др., 2002]

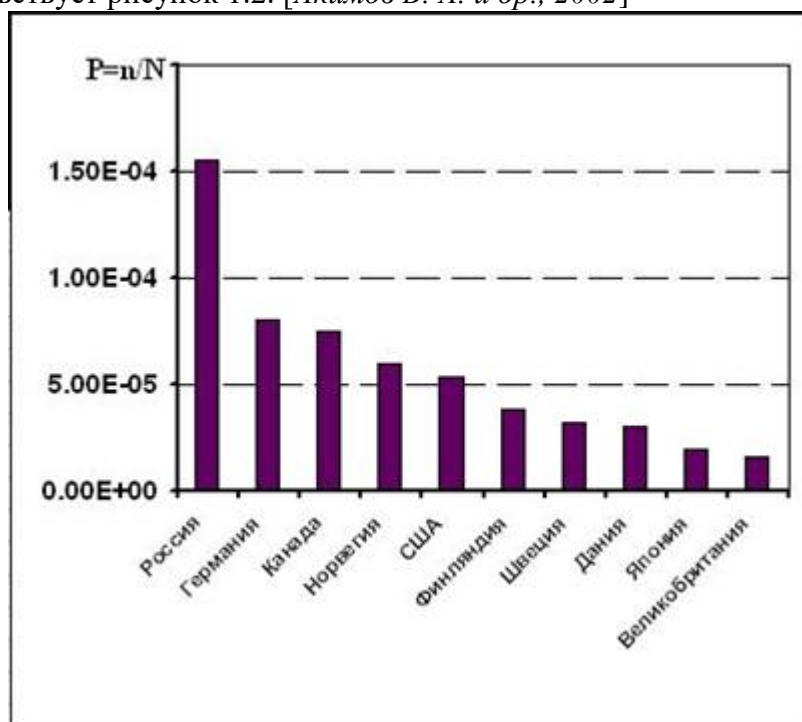


Рис. 1.2. Риск гибели в техногенных ЧС в разных странах

В заключение рассмотрения **индивидуального риска** следует отметить, что риск смерти от всех неестественных причин в России составляет величину порядка 10^{-3} в год.

При этом риск гибели в природных ЧС много меньше и составляет (10^{-7} - 10^{-6} в год), что сопоставимо с уровнем риска, не вызывающим особого беспокойства у общественности. Риск гибели в техногенной катастрофе в России по приведенным оценкам составляет величину порядка 1.0^{-4} - 1.5^{-4} в год, что заметно больше, чем в развитых странах.

Аналогичные данные о индивидуальном риске гибели по различным причинам за год в США приведены в таблице 1.1 [Донченко В.К. и др., 2010]:

Таблица 1.1

Индивидуальный риск гибели по различным причинам в США за год

Автомобильный транспорт	$3 \cdot 10^{-4}$
Падения	$9 \cdot 10^{-5}$
Пожар и ожоги	$4 \cdot 10^{-5}$
Утопление	$3 \cdot 10^{-5}$
Отравление	$2 \cdot 10^{-5}$
Огнестрельное оружие	$1 \cdot 10^{-5}$
Станочное оборудование	$1 \cdot 10^{-5}$
Водный транспорт	$9 \cdot 10^{-6}$
Воздушный транспорт	$9 \cdot 10^{-6}$
Падающие предметы	$6 \cdot 10^{-6}$
Электрический ток	$6 \cdot 10^{-6}$
Железная дорога	$4 \cdot 10^{-6}$
Молния	$5 \cdot 10^{-7}$
Все прочие	$4 \cdot 10^{-5}$
Общий риск	$6 \cdot 10^{-4}$
Ядерная энергия (100 реакторов)	$2 \cdot 10^{-10}$

В связи с данными, приведенными в таблице 1.1, стоит сделать два замечания.

1. Риск смерти от всех неестественных причин в России (10^{-3}) близок к аналогичному значению риска в США ($6 \cdot 10^{-4}$), несмотря на очевидные отличия в процедурах формирования статистических данных.

2. Обычно при уменьшении риска ниже уровня $1 \cdot 10^{-6}$ в год общественность не выражает чрезмерной озабоченности по поводу опасности того или иного явления. Например, человек обычно не проводит свою жизнь в страхе погибнуть от удара молнии при уровне риска $5 \cdot 10^{-7}$ (таблица 1.1). Поэтому при уровне риска ниже $1 \cdot 10^{-6}$ редко предпринимаются специальные меры для снижения степени риска. Но эта беззаботность не относится к ядерной энергетике, протесты против которой не прекращаются даже при уровне индивидуального риска $2 \cdot 10^{-10}$.

Эта особенность **восприятия риска** базируется на субъективном восприятии, свойственном людям. Люди больше опасаются маловероятных катастроф, в которых гибнет большое число людей. Например, вероятность погибнуть в автомобильной аварии $3 \cdot 10^{-4}$, а в авиационной катастрофе много меньше - $9 \cdot 10^{-6}$, но большинство людей опасаются летать самолетом и без всякой опаски пользуются автомобильным транспортом. В таком отношении большое значение имеет также то, что человек может мириться с риском много большим, если он принимается добровольно, а не зависит целиком от

внешних обстоятельств. Подобные соображения действуют и в случае восприятия рисков ядерной энергетики:

- последствия от аварии на атомной станции много тяжелее, чем на тепловой станции;
- атомные технологии до сих пор плохо понятны многим людям, а ко всему непонятному человек склонен относиться с большим подозрением;
- очень малые значения рисков ($2 \cdot 10^{-10}$) не воспринимаются человеком, и он скорее склонен ориентироваться на сильно преувеличенные рассказы об ужасах ядерной аварии.

Концепции риска. Развитие теории риска привело к последовательному формированию принципов, характеризующих отношение человека и общества к их роли в обеспечении безаварийного нормального функционирования техногенных объектов [Донченко В.К. и др., 2010]:

- принцип последовательного приближения к абсолютной безопасности, то есть к нулевому риску, предполагающий определенное сочетание альтернативных структур, технологий и т. п. и исследование этих сочетаний;
- принцип минимального риска, в соответствии с которым уровень опасности устанавливается настолько низким, насколько это реально достижимо, исходя из допущения, что любые затраты на защиту человека оправданы;
- принцип сбалансированного риска, следуя которому учитываются различные естественные опасности и антропогенные воздействия, изучается степень риска каждого события и условия, в которых люди подвергаются опасности;
- принцип приемлемого риска, базирующийся на анализе соотношений "затраты - риск", "выгода - риск", "затраты - выгода". Общество, исходя из своих возможностей, должно остановиться на некотором научно обоснованном приемлемом уровне риска.

Как и в большинстве стран мира, в России на сегодняшний день принята концепция **приемлемого риска**, исходящая из того, что полное исключение риска либо практически невозможно, либо экономически нецелесообразно. Переход к этой концепции в СССР произошел после Чернобыльской катастрофы [Кузьмин И.И., Шапошников Д.А., 1994]. До Чернобыльской катастрофы в атомной промышленности СССР преобладало стремление приблизиться к абсолютной безопасности, однако постепенно эта концепция перестала соответствовать законам техносферы. Эти законы имеют вероятностный характер, и нулевая вероятность аварии достигается лишь в системах, лишенных запасенной энергии, химических и биологически активных компонентов. На остальных же объектах (а таких большинство) чрезвычайные ситуации все равно возможны. Кроме того, Чернобыльская катастрофа высветила еще одну проблему - неадекватные действия персонала в нестандартной ситуации.

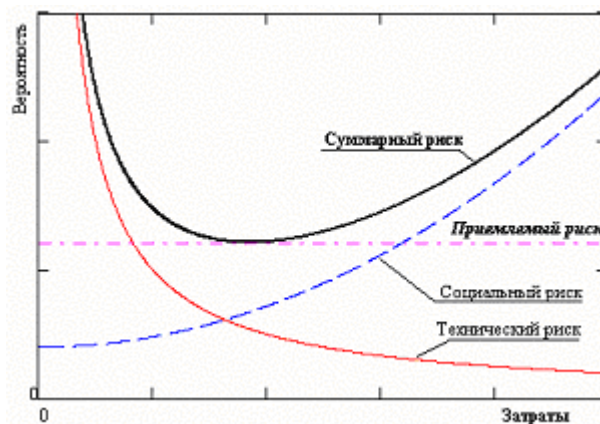


Рис. 1.3. Концепция приемлемого риска

Инженерные методы (дублирование важных систем, разработка специальных систем безопасности), а также подготовка высококвалифицированного персонала позволяют снизить риск аварии, но нельзя забывать о том, сколько за это придется заплатить. В том случае, когда средства вкладываются в увеличение безопасности технических систем, то неизбежно уменьшается финансирование других направлений (социальных программ и т. п.) [Донченко В.К. и др., 2010]. Весьма вероятно, что в итоге, даже с учетом уменьшения риска аварий, мы сократим среднюю продолжительность жизни человека и снизим ее качество. Это хорошо видно на графике зависимости риска (рис. 1.3) от затрат на технические системы безопасности. При увеличении затрат технический риск уменьшается, но растет социально-экономический. Кривая же суммарного риска имеет минимум при определенном соотношении между инвестициями в техническую и социальную сферы. Это надо учитывать при выборе уровня риска, с которым общество вынуждено мириться исходя из экономических и социальных соображений.

Обычно уровень приемлемого риска устанавливается по отношению к индивидуальному риску. В Европейских странах величина 10^{-6} законодательно принята в качестве порога приемлемого индивидуального риска от всех техногенных и природных опасностей. В некоторых странах устанавливается два уровня риска. При этом верхним уровнем приемлемого риска считается уровень 10^{-4} . Более высокий уровень риска считается совершенно неприемлемым. По российским нормам в качестве приемлемого риска рекомендуется величина $5 \cdot 10^{-5}$ (один человек из полумиллиона). Положительное решение невозможно при риске большем $1 \cdot 10^{-3}$. Исследование уровней риска обычно осуществляется в ходе проведения риск-анализа.

Риск-анализ [Донченко В.К. и др., 2010] – сравнительно новая область исследований, развившаяся как инструмент предотвращения ущерба на основе прогнозирования изменяющейся ситуации. В свою очередь, предотвращение ущерба адекватно получению прибыли. Например, при загрязнении воздуха увеличивается число респираторных заболеваний, а при сокращении загрязнения падают расходы на врачебное обслуживание (при этом затраты на очистку выбросов несет предприятие, а прибыль получают органы здравоохранения и страховщики). Отметим также, что природоохранные расходы не предполагают немедленной прибыли. Их цель – избежание будущего риска, для оценки затрат на достижение этой цели и необходимо провести риск-анализ, рассмотрев следующие факторы:

- число людей, которые могут пострадать,
- границы или площадь предполагаемого воздействия,
- природа и/или интенсивность воздействия,
- вероятность ущерба (риск может колебаться от «практически неизбежного» до «маловероятного»),
- близость угрозы,
- косвенные последствия,
- обратимость последствий.

Учитывая все эти факторы, можно получить более реалистичное представление о стоимости мероприятий, снижающих риск, как разнице между размером возможного ущерба при отсутствии защитных мер и при их осуществлении.

Оценки риска, необходимые для риск-анализа, носят циклический характер. Основными элементами цикла являются:

- сбор и обработка информации,
- оценка необходимости формирования информации с предупреждением о вероятной чрезвычайной ситуации (шторм предупреждения),

- выработка рекомендаций по изменению структуры системы защиты,
- анализ деятельности объекта в штатной ситуации.

Риск-анализ базируется на исследовании моделей, и в этом отношении он может рассматриваться как одно из направлений научных исследований.

1.2. Модели в науке и технике

Модели используются нами в течение всей жизни. Модели-игрушки помогают нам в детстве лучше понять окружающую действительность. Модели-описания, зафиксированные в книгах, открывают нам многообразие явлений в природе и обществе, с которыми мы до этого не сталкивались. Модели-картины позволяют по-новому взглянуть на привычный пейзаж. Модели-карты и модели-фотографии дают представление о местах на планете, в которых мы никогда не бывали. Из очень большого числа определений понятия «модель» мы будем пользоваться определением из Большой Советской Энциклопедии [БСЭ, 1969 – 1978 гг.]: «Модель (в широком понимании) — образ (в т. ч. условный или мысленный — изображение, описание, схема, чертеж, график, план, карта и т. п.) или прообраз (образец) какого-либо объекта или системы объектов (“оригинала” данной модели)».

Существует мнение, что моделирование — это органическая черта, присущая нашему мозгу. Мы постоянно используем модели в обычной жизни, но особое значение моделирование приобретает в такой специфической области человеческой деятельности, как наука. Считается, что все научное знание основывается на моделях [Аруцев А. А. и др., 2008], причем модели одновременно являются и способом представления знаний, и средством познания окружающего мира. Такой подход приводит к разнообразным вариантам использования моделей.

Рассмотрим эти варианты, следуя классификации, предложенной известным физиком Рудольфом Пайерлсом [Пайерлс Р., 1983].

- **Гипотеза.** Многие исследования начинаются с формулирования модели-гипотезы, подтверждение (или опровержение) которой составляет цель исследования. Если модель-гипотезу невозможно проверить независимыми исследованиями, то такую модель не следует рассматривать как научную.
- **Феноменологическая модель.** Имеются наблюдаемые факты, для объяснения которых предлагается подобная модель. По своей сути феноменологическая модель — гипотеза, нуждающаяся в дальнейших проверках. Однако в тех случаях, когда она проверена независимыми наблюдателями и позволяет составлять подтверждающиеся прогнозы, она может быть возведена в ранг феноменологической теории [Каница С. П., 1996].
- **Приближение.** В таких моделях что-то принимается очень малым или очень большим. Примером может служить приближение классической механики, справедливое, когда скорость тела много меньше скорости света. Например, для второго закона Ньютона ($F = ma$) масса тела принимается постоянной, тогда как при скоростях, сравнимых со скоростью тела, в приближении специальной теории относительности, масса тела начинает зависеть от скорости.
- **Упрощение.** В таких моделях опускаются некоторые детали, например, отклонения между результатами моделирования и результатами экспериментов. Иногда ученые на первых этапах не обращают внимание на противоречия в теории. Например, модель атома Бора, успешно объяснившая атомарные спектры, была невозможна с точки зрения классической электродинамики.

- **Эвристическая модель** не имеет количественного подтверждения, но способствует более глубокому проникновению в суть дела.
- **Аналогия.** В модели учитываются только некоторые особенности наблюдаемых явлений. Такие модели часто используются в геологии, когда характеристики нового месторождения пытаются угадать по аналогии с уже разведанными.
- **Мысленный эксперимент.** В такой модели главное состоит в опровержении какой-то возможности, когда путем преобразования модели мы приходим к противоречию с тем или иным принципом, который считается безусловно истинными. В книге [Горбань А. Н., 1988] к этой классификации предложено дополнение — «Демонстрация возможности», которая решает в какой-то степени задачу, обратную мысленному эксперименту, и демонстрирует внутреннюю непротиворечивость возможности. Следует обратить внимание на то, что и в мысленном эксперименте, и в демонстрации возможности содержательной является процедура, базирующаяся на модели, но не сама модель и эти модели по смыслу отличаются от первых шести.

В приведенной выше классификации Р. Пайерлса нет моделей, которые можно было бы считать «истиной в последней инстанции». Научные знания не претендуют на истинность, что определяется теми схемами, которые используются для получения научных знаний. Некоторые из таких схем обсуждаются ниже.

Гипотеза—эксперимент—установленный факт—проверка другими экспериментаторами—научное знание (модель, обеспечивающая возможность предсказания) — это классическая схема, предполагающая, что гипотеза должна быть проверена экспериментально, а полученные результаты подтверждены другими исследователями. В соответствии с такой схемой открыто большинство физических законов.

Однако в науке используются и другие схемы, например: **наблюдение—феноменологическая модель—установленный факт—проверка другими наблюдениями—научное знание** или **гипотеза—предсказание—проверка предсказания—научное знание**.

В качестве примера рассмотрим:

- 1) наблюдения Тихо Браге за орбитой Марса;
- 2) выведенные на их основе законы Кеплера, объяснившие особенности перемещения планеты;
- 3) теорию всемирного тяготения Ньютона, объяснившую законы Кеплера.

С некоторыми оговорками можно считать, что законы Кеплера получены по первой схеме на основе наблюдений Тихо Браге, а теория Ньютона — по второй. Законы Кеплера по своей сути являются феноменологическими моделями, однако, проверенные другими наблюдателями и для других планет, они стали научным знанием. Теория Ньютона, базирующаяся на гипотезе, которую мы сейчас называем законом всемирного тяготения, позволила вывести формулы, описывающие законы Кеплера, и тем самым позволила научным знаниям в этой области перейти на следующую ступень развития. Между тем теория Ньютона тоже не стала последней в цепочке «законы Кеплера — теория Ньютона». По вышеприведенной классификации, теория всемирного тяготения Ньютона является моделью-приближением, и представления, в ней заложенные, были существенно расширены в общей теории относительности А. Эйнштейна и других современных теориях космологии и гравитации.

Приведенный пример можно использовать для первичного рассмотрения вопроса об адекватности моделей. По определению, **адекватность модели** — это совпадение свойств (функций/параметров/характеристик и т. п.) модели и соответствующих свойств

моделируемого объекта. Естественно, что полного совпадения свойств модели и объекта быть не может. В случае полного совпадения модель превращается в моделируемый объект, что делает процесс моделирования бессмысленным. Поэтому адекватность модели — это совпадение не всех свойств модели и объекта, а только специально отобранных, которые считаются существенными для процесса моделирования. Но даже в этом случае полного совпадения свойств модели и объекта быть не может из-за различных погрешностей, сопровождающих процесс моделирования. Если модель используется для предсказания будущих событий, адекватность модели определяется успешностью предсказаний, сделанных на ее основе. Законы Кеплера адекватно описывают движение планет в Солнечной системе, так как на их основе можно успешно предсказывать будущее положение планет (с учетом погрешностей наблюдений и влияния притяжения других планет). Это дает основание принять модель за исходную точку для построения более сложных научных моделей, например, теории притяжения Ньютона, общей теории относительности Эйнштейна и т. п.

С точки зрения процесса моделирования возникающие задачи следует «разделить на два больших класса: **прямые задачи** (известны причины, необходимо найти следствия) и **обратные** (известны следствия, нужно найти причины)» [Ватульян А. О., 1998]. Задача расчета траектории планеты Марс на основе законов Кеплера является прямой, а задача уточнения гравитационной постоянной в законе тяготения Ньютона на основе наблюдений за движением планеты Марс — обратной. Для прямых и обратных задач проблема адекватности модели решается по-разному. В классической физике и основанных на ее законах технических приложениях существует большое число хорошо изученных моделей (физических законов), на основе которых решаются различные прямые задачи расчета механических, тепловых, электромагнитных параметров при известных начальных условиях. При этом адекватность решений прямых задач определяется корректностью расчетов и адекватностью используемых для расчетов физических законов (решений обратных задач). Выполнение этих двух условий автоматически обеспечивает правильность соответствующих предсказаний. Поэтому центральный момент в проблеме адекватности моделей — вопрос об адекватности обратных задач.

Для технических приложений соответствующие обратные задачи по установлению моделей (законов) и так называемых физических констант были решены классиками физики — Ньютоном, Кеплером и многими другими.

Для сложных технических систем модели строятся на основе решения прямых и обратных задач, базируясь на теории систем.

1.3. Системный подход к моделированию

Общая теория систем предложена в конце 30-х годов XX века австрийским биологом Людвигом фон Берталанфи и развита учеными многих стран после Второй мировой войны. Концепция открытых систем Берталанфи и общая теория систем возвели системное мышление в ранг главного научного направления в середине XX века, и для того чтобы лучше понять особенности моделирования сложных технических систем, следует хотя бы в самых общих чертах познакомиться с этой теорией [Биненко В.И. и др., 2012].

Система — это совокупность элементов, объединенных общей функциональной средой и целью функционирования. Элемент системы — это условно неделимая, самостоятельно функционирующая часть системы, определяющая ее состав. Функциональная среда системы — характерная для системы совокупность законов, алгоритмов и параметров, по которым осуществляется взаимодействие между элементами системы и функционирование системы в целом.

Компонент системы (подсистема) — множество относительно однородных элементов, объединенных общими функциями при обеспечении выполнения общих целей развития системы.

Структура системы — совокупность связей, по которым обеспечивается информационный, энерго- и массообмен между элементами системы, определяющий функционирование системы в целом и способы ее взаимодействия с внешней средой. Важнейшее свойство структуры — ее относительная устойчивость.

Морфология системы — зафиксированная в пространстве совокупность звеньев системы (конструкция системы). Любую систему можно рассматривать как подсистему более высокого уровня. Организация системы — это совокупность консервативных, медленно изменяющихся характеристик подсистем, т. е. их интегральных свойств.

Основные особенности (законы) теории систем:

1. Элементы, объединенные в систему, выступают как единое целое, при этом внутренние процессы, которые формируют систему, играют определяющую роль в ее существовании.

2. Система не сводится к сумме своих элементов (эмерджентность).

3. Вне системы элементы обладают другими свойствами, чем в системе.

4. Связь элементов внутри системы значительно сильнее, чем связь этих элементов с элементами других систем.

5. Любую систему можно рассматривать как подсистему более высокого уровня.

6. Свойства элементов (подсистем) не являются их внутренними свойствами, они могут быть осмыслены лишь в контексте системы через их интегральные свойства.

Любая достаточно сложная система сформирована из подсистем, организованных в некую иерархию. При формировании новой системы не выгодно создавать все подсистемы заново. Например, не эффективно для нового вида животных создавать заново подсистемы кровообращения, пищеварения и т. п. Поэтому большинство подсистем наследуется. Структура клетки, например, сформировалась в незапамятные времена. Более древние подсистемы обычно занимают более низкое место в иерархии — они являются подсистемами более новых подсистем (но это не значит, что они менее важны).

Система проявляется на следующем уровне через **интегральные свойства** — характеристики, важные для функционирования системы более высокого уровня. Для оценки интегральных свойств системы используются интегральные показатели. Как правило, интегральные свойства зависят от множества элементов системы и от ее структуры и носят вероятностный характер. Их значение можно понять только в контексте характеристик системы более высокого уровня.

Эмерджентность и связанные с ней законы обычно противопоставляют принципу редукционизма, который является одним из оснований классической физики. Напомним, что редукционизм — это методологический принцип, согласно которому сложные явления могут быть полностью объяснены на основе законов, свойственных более простым явлениям. Например, биологические явления должны объясняться с помощью физических и химических законов; социологические явления — с помощью биологических законов и т. п. Этот принцип достаточно хорошо работает в классической физике. Например, температура тела в рамках классической термодинамики определяется движением его молекул, электрические явления объясняются движением заряженных частиц. Многочисленные попытки, предпринимавшиеся учеными, чтобы объяснить особенности живых организмов, исходя из свойств молекул и описывая их движение, не привели к желаемому результату, и это стало одним из главных мотивов для распространения системного подхода.

Развитие системы. Развитие - это необратимое, направленное, закономерное изменение системы, ее универсальное свойство; в результате развития возникает новое качественное состояние системы - ее состава или структуры. Различают две формы развития - эволюционную, связанную с постепенными количественными изменениями системы, и революционную, характеризующуюся быстрыми качественными изменениями в структуре системы. Постепенное эволюционное изменение некоторых параметров в течение заметного времени сопровождается соответствующим постепенным изменением состояния системы, но в определенный момент происходит разрыв постепенности: состояние системы меняется скачком, система переходит на новый качественный уровень, количество переходит в качество. Развитие может быть прогрессивным и регрессивным - например, увеличение численности вида или уменьшение численности вплоть до полного исчезновения. Развитие системы основывается, во-первых, на формировании новых подсистем, занимающих более высокое место в иерархии, чем унаследованные подсистемы, а во-вторых, в установлении многочисленных связей между подсистемами. В сложных системах эти связи, как правило, основываются на обмене информацией. Такое развитие называют самоорганизацией системы, чтобы подчеркнуть, что развитие происходит за счет внутренних ресурсов системы, а не за счет внешнего плана. Самоорганизация системы - усложнение ее структуры, которая обеспечивает более эффективную реакцию системы на внешние условия (с точки зрения целей функционирования системы). Самоорганизация - характерная черта систем, отличающих их, например, от кибернетических устройств, которые могут обладать многими свойствами систем, но сконструированы по замыслу человека

Системный подход — это методология научного познания и социальной практики, в основе которой лежит исследование объектов как систем [БСЭ, 1969 – 1978 гг.]. Существует мнение [Капра Ф., 2002], что системный подход ориентирует исследование на свойства целого, которыми не обладает ни одна из его частей. Новые свойства возникают из взаимодействий и взаимоотношений между частями. Наблюдаемые свойства частей системы не являются их внутренними свойствами, но проявляются лишь в контексте более крупного целого. При этом на первый план выходят:

- раскрытие целостности объекта и обеспечивающих ее механизмов;
- выявление многообразных типов связей (контекста) сложного объекта и сведение их в единую сеть;
- представление сложного объекта иерархической системой взаимосвязанных подсистем, позволяющих фиксировать целостные свойства объекта, его структуру и динамику.

Открытые системы. Согласно второму закону термодинамики, любая изолированная система будет развиваться в направлении постоянно нарастающего беспорядка, что характеризуется увеличением энтропии. Людвиг фон Бергаланфи признал, что живые организмы являются открытыми системами, которые не могут быть описаны в рамках классической термодинамики. Он назвал такие системы «открытыми», поскольку поддерживать свою жизнь им приходится, подпитывая себя через непрерывный поток материи и энергии из окружающей среды и каким-то образом избавляясь от вещества и энергии, не нужных для функционирования системы. В живых организмах такие процессы носят общее название «метаболизм», который представляет собой процесс превращения химических веществ в организме, обеспечивающий его существование. В открытых системах энтропия может снижаться, и второй закон термодинамики здесь не приложим. Формулировка новой термодинамики для открытых систем связана с именем Ильи Пригожина (1970-е годы), многие исследования которого проводились на специальной

модели диссипативной структуры (брюсселятор) [Курдюмов С., Малинецкий Г., 2010], которая обсуждается ниже в разделе 2.3.

Математическое моделирование технических систем в большинстве случаев базируется на системном подходе и использует как прямые задачи (дифференциальные и алгебраические модели), так и обратные задачи (статистические модели).

2. Математические модели на основе дифференциальных уравнений

2.1. Введение в SciLAB

SciLAB – свободно распространяемый аналог MatLAB - пакет для математических расчетов, ориентированный на решение широкого круга задач [Baudin M., 2010]:

- линейная алгебра и разреженные матрицы,
- полиномы и рациональные функции,
- интерполяция и аппроксимация,
- линейная, квадратичная и нелинейная оптимизация,
- обыкновенные дифференциальные уравнения, дифференциально-алгебраические уравнения,
- классическое и робастное управление, решение линейных матричных неравенств,
- оптимизация дифференцируемых и недифференцируемых функций,
- обработка сигналов,
- математическая статистика.

В данных лабораторных работах изучаются основы работы с пакетом SciLAB - организация вычислений, построение графиков и т. п.

Скачать пакет можно с сайта <http://www.scilab.org/>. Документацию на английском языке можно найти на сайте <http://www.scilab.org/resources/documentation>. Для SciLAB разработана обширная справочная система, которая вызывается стандартным образом (F1).

Стоит обратить внимание на то, что SciLAB, как многие свободно распространяемые пакеты, имеет постоянно изменяющийся интерфейс. Поэтому не стоит ориентироваться на документацию, написанную для ранних версий SciLAB, - это чревато ошибками.

В сети Интернет можно найти громадное число книг (учебников, руководств) на английском языке и существенно меньше на русском. На русском языке наиболее адекватна, с нашей точки зрения, книга «Scilab: Решение инженерных и математических задач» и сайт одного из авторов книги – Алексеева Е. Р. - http://teacher.ucoz.net/index/ob_avtore/0-19 (дата обращения: 29.10.2013), но при этом следует обратить внимание, что книга ориентирована на версию SciLAB 4.x.x, и использование исходных текстов программ может приводить к ошибкам. Кроме этого, может быть полезен сайт «Руководство по работе с пакетом SCILAB» (Павлова М. И.) - http://www.csa.ru/~zebra/my_scilab/ (дата обращения: 29.10.2013)

Первая версия настоящих лабораторных работ составлена в 2011 г. для версий 5.2.0 - 5.3.2 SciLAB; затем они существенно расширены и откорректированы в 2012 – 2013 гг. для версий 5.3. - 5.4. Первая версия лабораторных работ (2011) опубликована в учебном пособии [Донченко В. К., Растоскуев В. В., 2011]

Общий вид окон при работе со SciLAB показан на рисунке 2.1. Всего мы видим три окна:

1. Командное окно: загрузка и запуск программ и многое другое:
Файл > Выполнить + имя файла
2. Окно редактора (Editor): редактирование, отладка и запуск программ.
3. Графическое окно для вывода графиков

Программы хранятся в файлах с расширением .sce и запускаются 1) либо из командного окна (Файл > Выполнить > *ИмяФайла*), 2) либо из окна редактора (кнопка Выполнение). При выполнении программы в случае 1) результаты будут выводиться полностью в командном окне, в случае 2) обычно выводится только график.

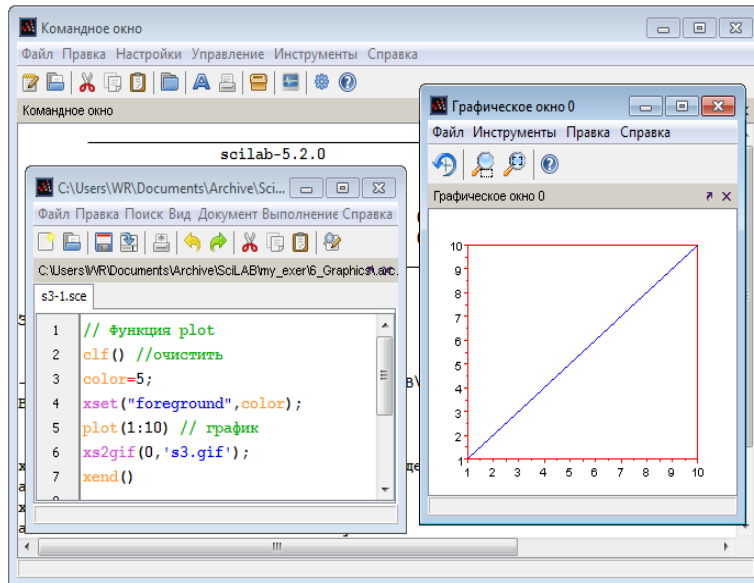


Рис. 2.1. Общий вид окон в пакете SciLAB

КОМПЕТЕНТНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАНИЯ

Простые вычисления.

```

sin(%pi/6) // вычисление
a = -4;     // присвоение
a = abs(a) // абсолютное значение
b = a + sqrt(a) // вычисление с переменной

```

Попробуйте ввести эти 4 строчки в текстовом редакторе SciNotes и сохраните файл под каким-либо именем (например, lab1-1-1). В SciLAB при вычислении (или присвоении) может определяться переменная (в первом случае a , во втором b). Но при вычислении (как в строчке 1) присвоение не обязательно, в этом случае по умолчанию используется переменная ans . $\%pi$ - специальная предопределенная константа «пи». Двойным слешем ($//$), как во многих языках программирования, обозначаются комментарии. Точка с запятой ($;$) в конце оператора предписывает не выводить на экран соответствующий результат, и наоборот, если строчка не заканчивается точкой с запятой ($;$), результаты выполнения выводятся на экран в командное окно.

Запустите сохраненный файл на выполнение (Файл > Выполнить...). В результате выполнения этой программки в командное окно будут выведены следующие значения:

```

ans = 0.5
a = 4.
b = 6.

```

Что означают эти числа?

Составьте программу для выполнения следующего кода:

```

// -----Элементарные математические операции-----
a=3; b=2;
c=a+b // = 5.
d=a-b // = 1.
e=a*b // = 6.

```

```

f=a/b      // = 1.5
1+2+3+4+5+6+7+... //... - перенос длинного выражения
8+9+10     // = 55
clear // очистка переменных
// --Возведение в степень (различные способы) ---
x = 2;
x^2
x.^2
x**2
// ----- Специальные константы -----
a = 2+3*i // комплексные числа - %i - мнимая единица
b = %pi; // 3.1415927
c = %e; // 2.7182818
// форматный ввод: pi ^e- = 22.4592; -e^pi = 23.1407
Printf ("pi^e = %1.4f; e^pi= %1.4f ",b^c, c^b)
clear // - очистка переменных

```

Построение графика

Более подробно особенности программирования на SciLAB рассмотрим на примере построения графика функции

$$y = \sin(x)/(x/a) \quad (2.1)$$

```

// Упражнение 1.1. Построение простого графика
x=[-10:0.2:10]'; // определение массива x (от -10 до 10 с шагом
0.2
s = size(x);      // размер массива x
len = s(1);      // длина одномерного массива
// Инициализация массивов
f2 = zeros(1,len)';
f1 = zeros(1,len)';

// Определение функции
funcprot(0)
a = 4;
function y = f(x)
    if x <> 0
        y = sin(x)/(x/a);
    else
        y = 0
    end
endfunction

// Определение массива
for j=1:len
    f1(j) = f(x(j));
end
// построение графика
clf()
plot(x, [sin(x) f2 f1])

```

В первых трех строчках определяется массив $x()$ и его длина. Затем происходит инициализация нулями массивов $f2$ и $f1$. После этого осуществляется определение функции (2.1). Точка $x=0$ является особой — в ней происходит деление ноль на ноль, поэтому конструкция с условным оператором *if* обеспечивает обход этой точки (функции в этой точке присваивается значение 0). Следующая задача состоит в определении массивов. Массив $f2()$ был сформирован при инициализации из нулевых элементов. Теперь следует определить массив $f1(x)$. В принципе в SciLAB есть возможность применения функций к массивам, но в данном случае приходится решать проблему с помощью цикла *for ... end*. И, наконец, в последнем блоке строим график. Функция *clf()* обеспечивает очистку экрана, а функция *plot()* - вывод графика.

Аргументы функции *plot()* состоят из 3 частей: 1) x , $\sin(x)$; 2) x , $f2$ и 3) x , $f1$. Они демонстрируют три разных способа вывода графиков:

- Значения $\sin(x)$ определяются непосредственно при построении графика. Этот способ очень простой и логичный, но годится он только для стандартных функций SciLAB. Если уверенности в том, что функция стандартная, нет, его лучше вообще не использовать, т. к. это чревато ошибками.

- Вектор $f2$ выводится с помощью предварительно предопределенного одномерного массива длиной, равной длине вектора x . Этот способ достаточно надежен, хотя определение массива может потребовать довольно сложных программных конструкций.

- Третий способ основывается на использовании предопределенного массива $f1$, содержащего значения функции.

График, который должен у вас получиться, показан на рисунке.

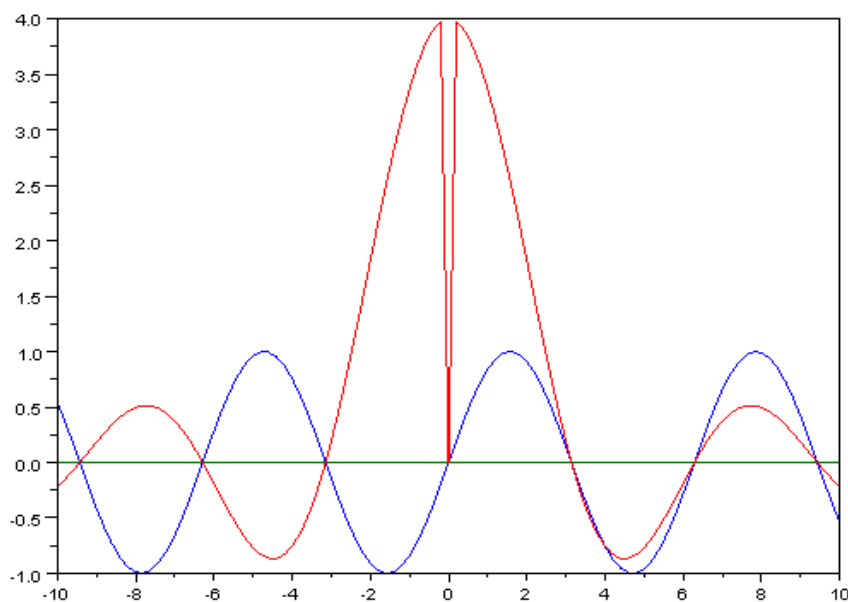


Рис. 2.2. Построенный простой график

2.2. Модели с отрицательными и положительными обратными связями

Описанные выше модели технических систем в математическом моделировании техносферной безопасности используются различными способами. Самый простой — это так называемая модель «черный ящик», представленная на рисунке 2.3. В этом случае система рассматривается как единое целое, о котором практически ничего не известно.

Основой для моделирования служат наборы данных, характеризующие поведение системы во времени и/или отклик системы на внешние воздействия. В простейшем случае наборы данных представляются графически в виде диаграмм, графиков различного типа, сплайн-аппроксимаций, временных рядов и т. п. и в таком виде используются для принятия решений. В более сложном случае для системы формируется гипотеза о виде связи $Y = f(X, b_i)$ и на основе имеющихся наборов данных определяются параметры модели b_i . Полученное таким образом решение обратной задачи используется для прогноза.

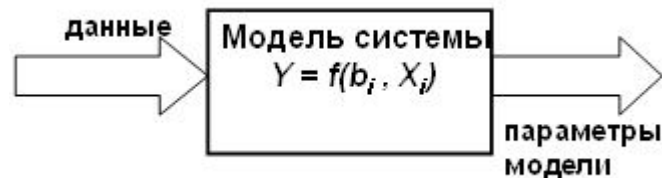


Рис. 2.3. Модель «черный ящик»

Некоторой модификацией модели «черный ящик» является представление системы в виде однородных подсистем, не взаимодействующих между собой. Примером может служить представление гидроэлектростанции набором гидротурбин, для каждой из которых анализируется изменение некоторых интегральных характеристик, и на основе этого составляется прогноз для гидроэлектростанции в целом. Усложнение такого представления основывается на учете различий между подсистемами и разнообразия взаимодействий между ними, как показано на рисунке 2.4.

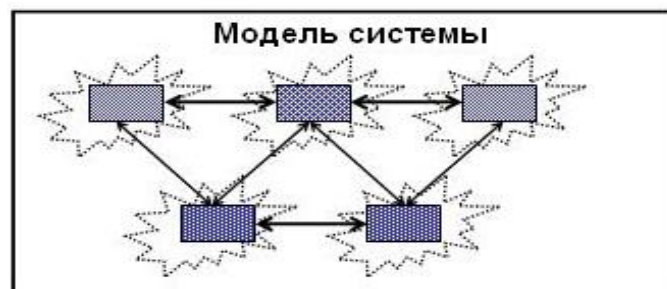


Рис. 2.4. Модель, составленная из взаимодействующих подсистем

Различные подсистемы по-разному воздействуют друг на друга и таким образом формируют свойства модели системы. Взаимодействия между подсистемами реализуются в виде обратных связей, когда результат функционирования какой-либо подсистемы влияет на параметры, от которых зависит функционирование этой. Различают два типа обратных связей - положительные и отрицательные. При положительной обратной связи изменение параметров подсистемы приводит к ускорению изменения, при отрицательной - к замедлению изменения. Наличие отрицательных обратных связей обеспечивает устойчивое функционирование системы, а возникновение положительных обратных связей во многих случаях ведет к чрезвычайной ситуации.

Простой пример поведения системы показан на рисунке 2.5, на котором изображен некий профиль (скажем потенциальная энергия), характеризующий свойства системы.

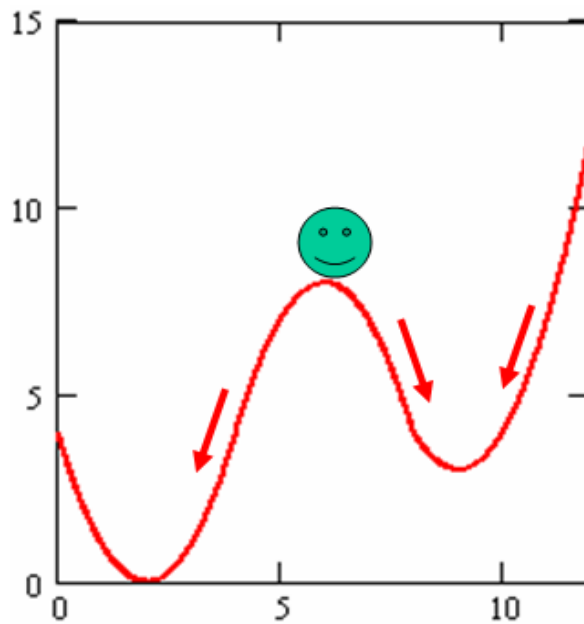


Рис. 2.5. Пример положительных и отрицательных обратных связей

Профиль представляет собой два локальных минимума ("ямы"), разделенных барьером. Шарик находится на вершине барьера в состоянии неустойчивого равновесия. Более того, он находится в точке бифуркации, т. к. непонятно, в какую из ям он покатится. Но как только шарик двинется в какую-либо сторону, он попадает под действие положительной обратной связи, и он все быстрее покатится в яму. В яме начнут действовать отрицательные обратные связи (движение шарика вверх увеличивает силу сопротивления движению), и шарик после несколько колебаний окажется в состоянии равновесия.

Обычно взаимодействия между подсистемами определяются дифференциальными уравнениями, и свойства системы выявляются в результате решения прямой задачи, при этом наличие или отсутствие обратных связей определяет свойства системы. В данном разделе рассматривается несколько задач, связанных с поведением системы при наличии положительных и отрицательных обратных связей.

Модель популяции без ограничений. В случае, если каждая особь (например, бактерия) в популяции порождает k новых особей, численность популяции $y(t)$ описывается очевидным дифференциальным уравнением [Петросян Н. А., Захаров В. В., 1986]:

$$\frac{dy(t)}{dt} = k \cdot y(t) \quad (2.2)$$

Такие уравнения называются дифференциальными уравнениями первого порядка. Эти уравнения по определению могут содержать, помимо самой искомой функции $y(t)$, только ее первую производную $y'(t)$. В подавляющем большинстве случаев дифференциальное уравнение можно записать в форме Коши: $y'(t) = f(y(t), t)$. Для такого случая в SciLAB предусмотрен стандартный способ решения, который демонстрируется следующей программой:

```
// Упражнение 2.1 - уравнение популяции
// уравнение вида dy/dt = f(t; y), y(t0) = y0
```

```

t = [0:0.1:7]; // ось времени
// начальные значения
y0 = 1;
t0 = 0;
// Определение функции  $y'(t) = k y(t)$ 
k = 2;
function yd=f(t,y) //
yd = k*y
endfunction
// решение дифференциального уравнения
y=ode(y0,t0,t,f);
// построение графика
clf()
plot(t, [y])
xgrid()

```

В результате выполнения этой программы отображается график, показанный на рис. 2.6. На рисунке приведен пример положительной обратной связи. Рост популяции начинается с одной особи, которая оставляет двух потомков ($k = 2$). На следующем шаге потомков будет 4, потом 8 и т. п. При этом численность популяции будет быстро расти, как это показано на рисунке, но этот рост не может быть безграничным из-за ограниченности ресурсов. Как только ресурсы (пища и т. п.) будут исчерпаны, произойдет катастрофа - популяция погибнет.

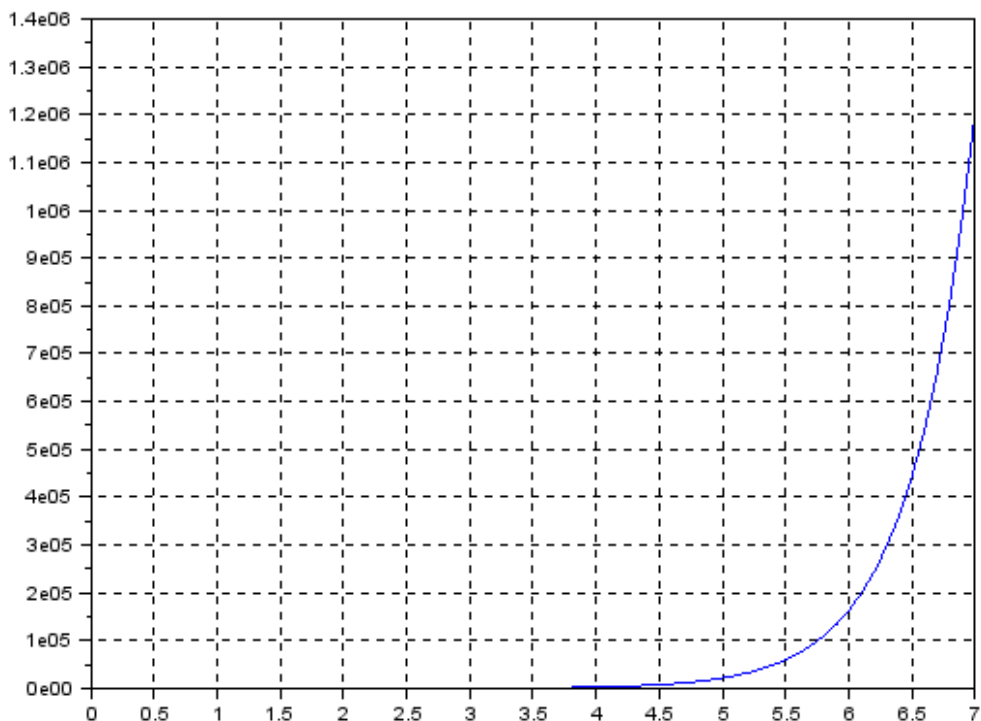


Рис. 2.6. Модель популяции без ограничений

Модель популяции с ограничениями. Гибель всей популяции представляется мало вероятной. Более реалистично выглядит случай, описывающий ограниченный рост, для которого на каком-то этапе включаются отрицательные обратные связи, и рост популяции замедляется. Этот случай обычно называют моделью Ферхюльста [*Петросян Н. А., Захаров В. В., 1986*].

$$\frac{dy(t)}{dt} = k \cdot y(t) \cdot \frac{(L - y(t))}{L} \quad (2.3)$$

Значение L определяет предел роста. Когда численность популяции $y(t)$ приближается к этому значению включается отрицательная обратная связь и рост популяции замедляется. Когда численность популяции достигает предельного значения, правая часть уравнения (2.3) обращается в нуль, и рост популяции прекращается. Детали решения уравнения (3.3) показаны ниже.

```
// Упражнение 2.1b - уравнение популяции с ограничениями
// ( уравнение Ферхюльста )
t = [0:0.1:10];
y0 = 1;
t0 = 0;
// Определение функции y'(t) = k y(t)
funcprot(0)
k = 2;
L = 1000000;
function yd=f(t,y)
    yd = k*y*(L-y)/L
endfunction
// решение дифференциального уравнения
y=ode(y0,t0,t,f);
// построение графика
clf()
plot(t, [y])
```

В результате выполнения этой программы отображается график (рис. 2.7):

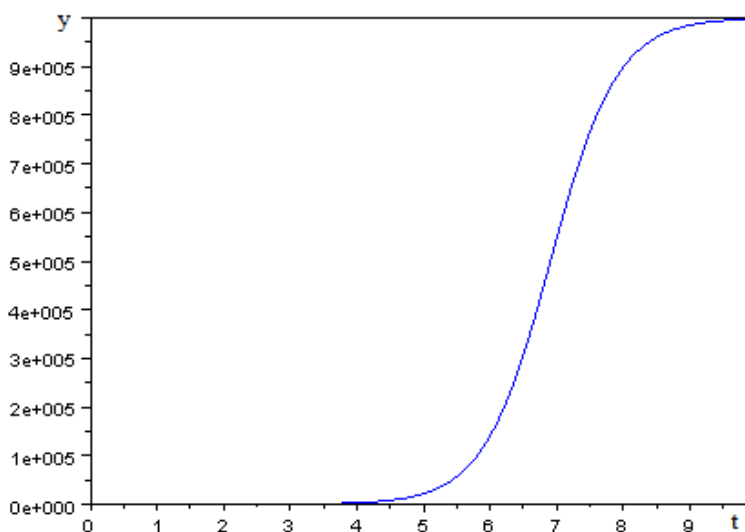


Рис. 2.7. Модель популяции с ограничениями

Кривая на рисунке 2.7 напоминает гипотетическую зависимость роста численности населения Земли до конца XXI столетия [Капица С. П., 1996]. Если отвлечься от деталей, на замедление роста населения Земли влияет тот же механизм включения отрицательной обратной связи, обусловленный нехваткой ресурсов и обсуждавшийся еще в работах Мальтуса [Глейк Дж., 2001].

Последовательность Фейгенбаума. Рассмотренные примеры очень просты. Модель популяции без ограничений основана на положительной обратной связи, и поведение решения (численность популяции) интуитивно понятно. Включение отрицательной обратной связи и замедление роста популяции в модели Ферхюльста также очевидно и, казалось бы, в таких одномерных задачах ничего сложного быть не может. Рассмотрим, однако, одну из разновидностей уравнения Ферхлюста (в соответствующей записи) [Глейк Дж., 2001]:

$$x_n = k \cdot x_{n-1} \cdot (1 - x_{n-1}) \quad (2.4)$$

По мере того как x_n приближается к 1, значение $(1 - x_{n-1})$ стремится к нулю, включается отрицательная обратная связь, и рост популяции замедляется. Уравнение (2.4) исследовалось в течение многих лет различными учеными, но в последнее время оно обычно связывается с именем Митчелла Фейгенбаума, который в 1976 г., отталкиваясь от результатов исследования этого уравнения, открыл механизм перехода к хаосу при изменении параметра k .

Программа для уравнения (2.4) очень проста:

```
// Циклы Фейгенбаума
step = 0.001;
i = [0.001:step:0.051]
s = size(i); // размеры массива x
len = s(2); // длина одномерного массива
k = 2.;
// Определение массива
x = zeros(1, len);
x(1) = 0.001;
for j=1:len-1
    x(j+1) = k*x(j)*(1-x(j));
end
// Построение графика
plot(i, x,)
```

Установлены следующие особенности поведения решения (2.4) в зависимости от величины k .

1. Если k больше 0 и меньше 1, популяция в конце концов вымрет, независимо от начальных условий. Это довольно очевидно, так как в случае $k < 1$ популяция постоянно уменьшается. На рисунке 2.8 показано изменение численности популяции при $k = 0.5$ и нескольких различных начальных значениях, подтверждающее этот вывод.
2. Если k больше 1 и меньше 2, численность популяции быстро выходит на стационарное значение. Изменение численности в этом случае характерно для уравнения Ферхюльста (рисунок 2.7), и поведение решения ожидаемо. На рисунке 2.9 показано изменение численности популяции при $k = 1.5$ и нескольких различных начальных значениях.

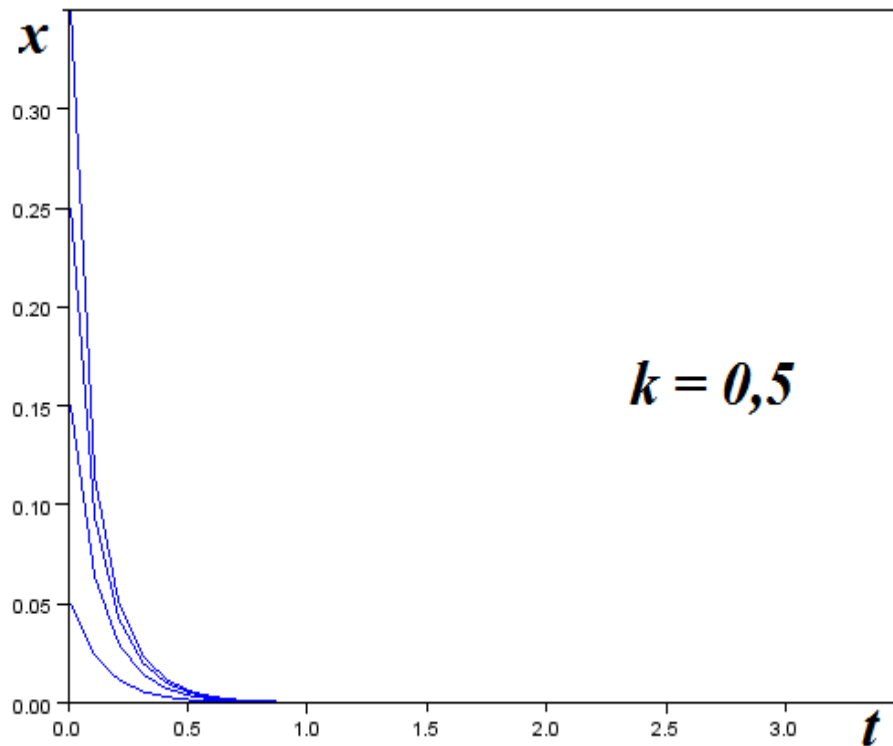


Рис. 2.8. Изменение численности популяции при $k = 0.5$

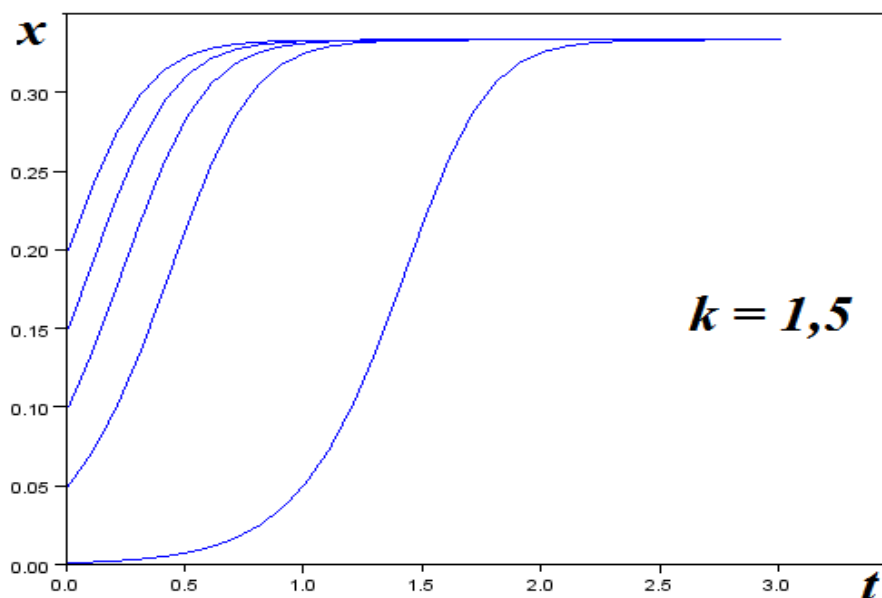


Рис. 2.9. Изменение численности популяции при $k = 1.5$

3. Если k больше 2 и меньше 3, численность популяции выйдет на стационарное значение $(k-1)/k$, независимо от начальных условий, но вначале будет несколько колебаться вокруг него (рисунок 2.10). Эти колебания - нечто новое в поведении решения, т. к. решение Ферхюльста таких особенностей не имеет.

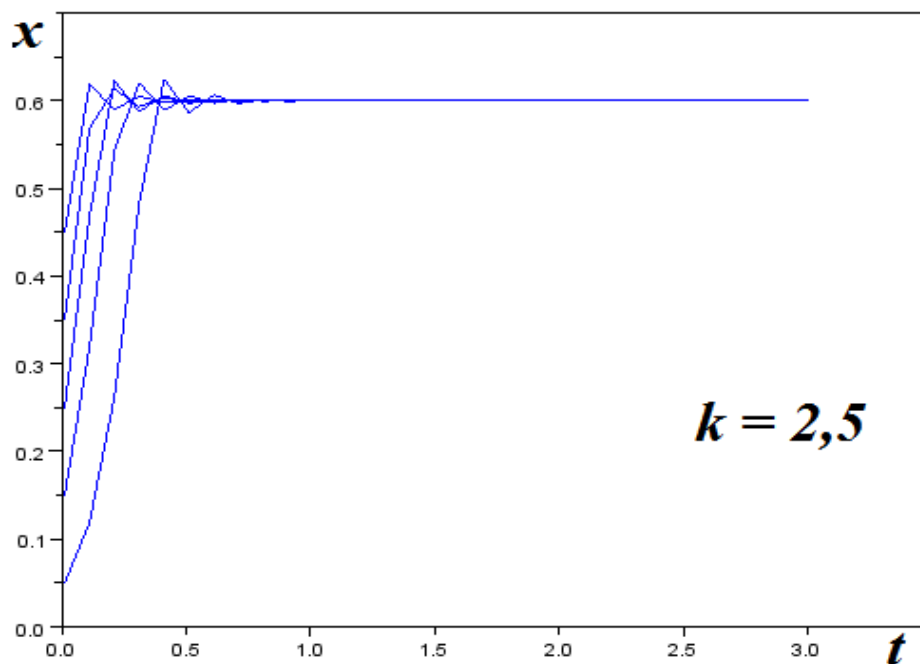


Рис. 2.10. Изменение численности популяции при $k = 2.5$

4. Если k больше 3 (первая точка бифуркации) и меньше $1 + \sqrt{6}$ (приблизительно 3.45) - вторая точка бифуркации), поведение системы становится еще более странным. В этом случае численность популяции будет бесконечно колебаться между двумя значениями, как показано на рис. 2.11 при $k = 3.2$

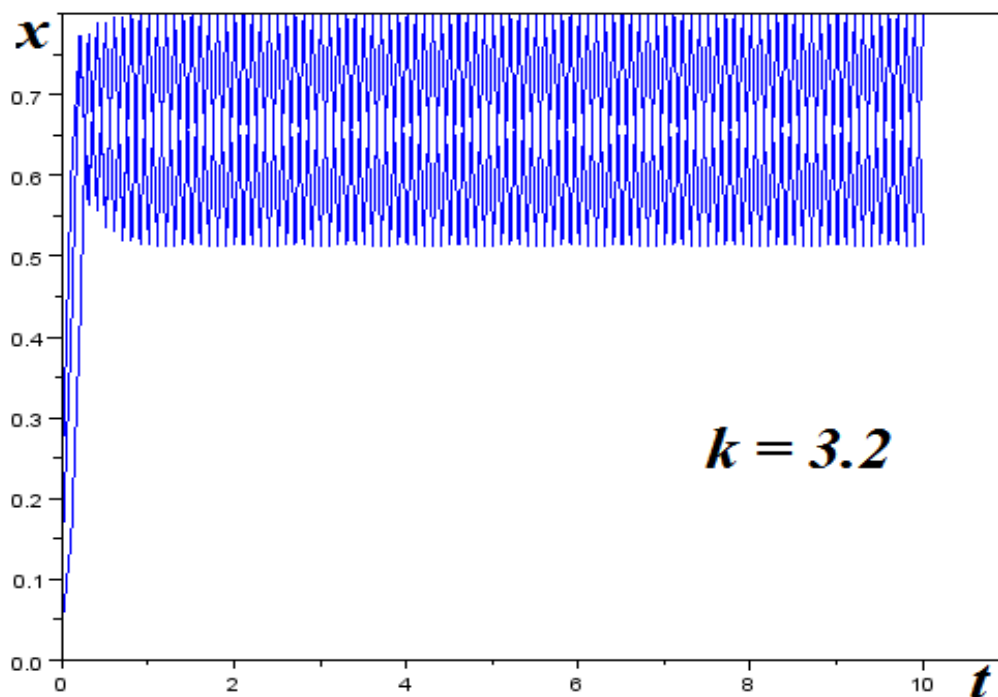


Рис. 2.11. Изменение численности популяции при $k = 3.2$

5. Если k больше 3.45 (третья точка бифуркации) и меньше 3.54 (приблизительно), то численность популяции будет бесконечно колебаться между четырьмя значениями, как показано на рис. 2.12 для $k = 3.5$

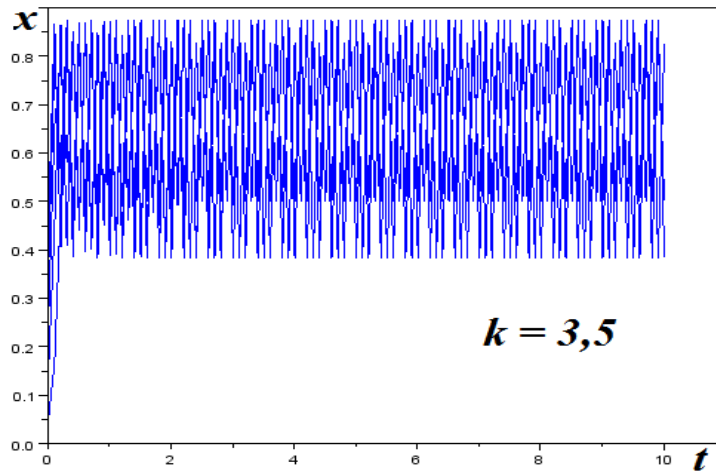


Рис. 2.12. Изменение численности популяции при $k = 3.5$

6. После значения $k = 3.54$ наступает хаос (рисунок 2.13)

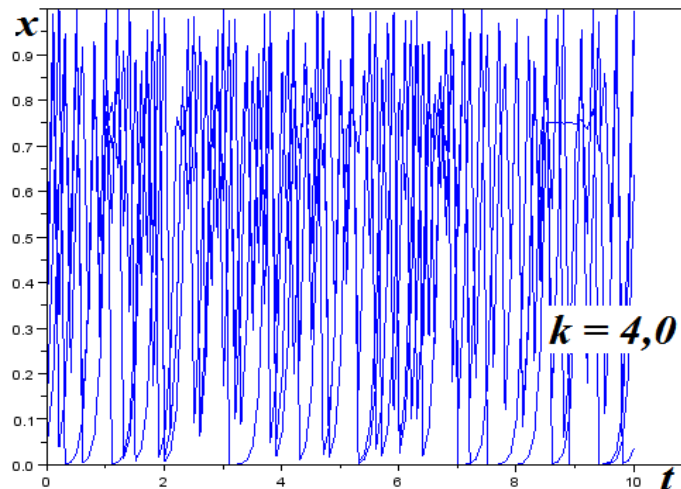


Рис. 2.13. Изменение численности популяции при $k = 4.0$

Рассмотрение последовательности Фейгенбаума позволяет прийти к заключению о том, что даже в моделях систем с очень простым, на первый взгляд, поведением, основанном на включении отрицательных обратных связей, реальное поведение модели может быть неизмеримо сложнее.

Уравнение «хищник–жертва». Модель взаимодействия «хищник–жертва» независимо предложили в 1925–1927 гг. Лотка и Вольтерра. Два дифференциальных уравнения моделируют динамику изменения численности двух биологических популяций: «жертвы» x_0 и «хищника» x_1 . Предполагается, что «жертвы» размножаются с постоянной скоростью ε_0 , а их численность убывает вследствие поедания «хищниками» со скоростью

γ «Хищники» же размножаются со скоростью, пропорциональной количеству пищи (с коэффициентом γ), и умирают естественным образом (смертность определяется константой ε) [Петросян Н. А., Захаров В. В., 1986]. Динамика изменения популяций «хищников» и «жертв» представлена на рис.2.14.

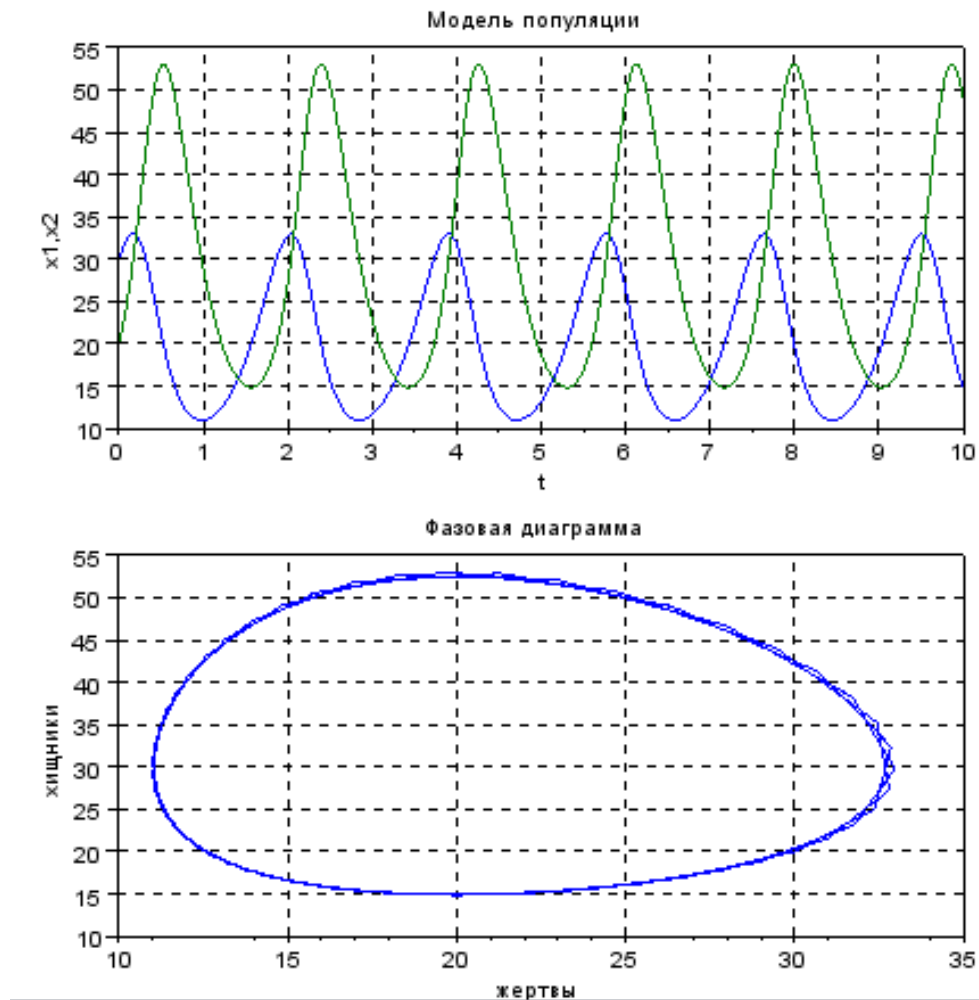


Рис. 2.14. Модель «хищник–жертва»

2.3. Модели, основанные на нелинейных дифференциальных уравнениях

Модели, основанные на нелинейных дифференциальных уравнениях, в которые хотя бы одна из производных или переменных входит нелинейно, являются предметом изучения нелинейной динамики [Владимиров В.А. и др., 2000]. Обычно в этой области выделяют два направления исследований - динамический хаос и открытые нелинейные системы. Самой простой иллюстрацией процессов возникновения динамического хаоса считается аттрактор Лоренца. Открытые нелинейные системы, следуя И. Р. Пригожину, обычно иллюстрируются системой, которая называется брусселятором.

Аттрактор Лоренца. В последние годы широкую известность приобрела модель, предложенная в 1963 г. Э. Лоренцем, занимавшимся прогнозом погоды и моделированием атмосферных процессов. Эта модель описывается следующей простой системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \sigma \cdot (y - x) \\ \frac{dy}{dt} &= x \cdot (b - z) - y \\ \frac{dz}{dt} &= x \cdot y - r \cdot z\end{aligned}\tag{2.6}$$

Система (2.6) должна считаться нелинейной, так как содержит произведения переменных - $x \cdot z$ и $x \cdot y$, но решение ее не сложнее, чем в предыдущем случае для уравнения «хищник–жертва».

```
// Решение системы Лорентца из 3 нелинейных уравнений
s = 10; r = 8/3; b = 19; // Значения коэффициентов
y0 = [10 10 10]' // Начальные значения
// Определение функции
function dy=f(t,y)
    dy(1) = s*y(2) - s*y(1)
    dy(2) = -y(1)*y(3) + b*y(1) - y(2)
    dy(3) = y(2)*y(1) - r*y(3)
endfunction
// решение системы дифф. уравнений
t0 = 0;
t = [0:0.03:30];
y = ode(y0,t0,t,f);
// график
plot(t,y)
```

Особый интерес эта система представляет в связи зависимостью решения от значения коэффициента b .

При значениях коэффициентов $\sigma = 10$, $b = 19$, $r = 8/3$ решение системы дифференциальных уравнений показано на рис. 2.15, а при значении коэффициента $b = 22$ — на рис. 2.16.

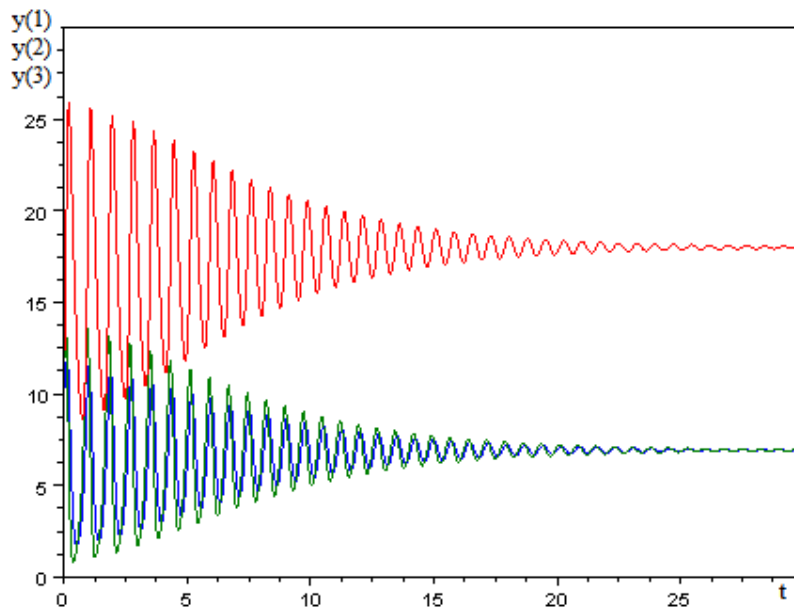


Рис. 2.15. Решение системы (2.6) при значении коэффициента $b = 19$

В первом случае решение устойчиво - при увеличении t решения быстро сходятся к некоторым асимптотам. Однако при увеличении значения коэффициента b система проходит точку бифуркации, и решение постепенно теряет устойчивость. При $b = 22$ решение демонстрирует достаточно сложное и непериодическое поведение, которое в последнее время принято называть динамическим хаосом.

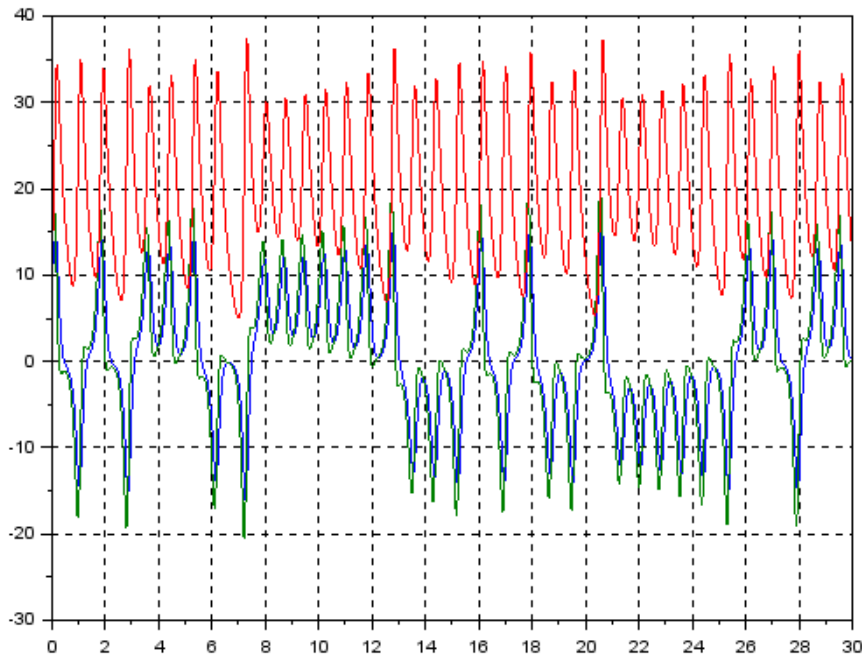


Рис. 2.16. Решение системы (2.6) при значении коэффициента $b = 22$ (хаос)

Фазовая диаграмма для системы (2.6) рассчитывается программой:

```
// 5. Аттрактор Лоренца - фазовая диаграмма
clear() // очистим переменные
s = 10; r = 8/3; b = 19; // Значения коэффициентов
y0 = [10 10 10]'; // Начальные значения
// Определение функции
function dy=f(t,y)
    dy(1) = s*y(2) - s*y(1)
    dy(2) = -y(1)*y(3) + b*y(1) - y(2)
    dy(3) = y(2)*y(1) - r*y(3)
endfunction
// решение системы дифф. уравнений
t0 = 0;
t = [0:0.03:30];
y = ode(y0,t0,t,f);
// График - фазовая диаграмма
s = size(t); // размеры массива x
len = s(2); // длина одномерного массива
// Определение массивов X, Y, Z для построения графика
for j=1:len
    X(j) = y(1, j);
    Y(j) = y(2, j);
    Z(j) = y(3, j);
```

```
end  
plot3d3(x, y, z)
```

Фазовая диаграмма системы (2.6) при $b = 19$ приведена ниже:

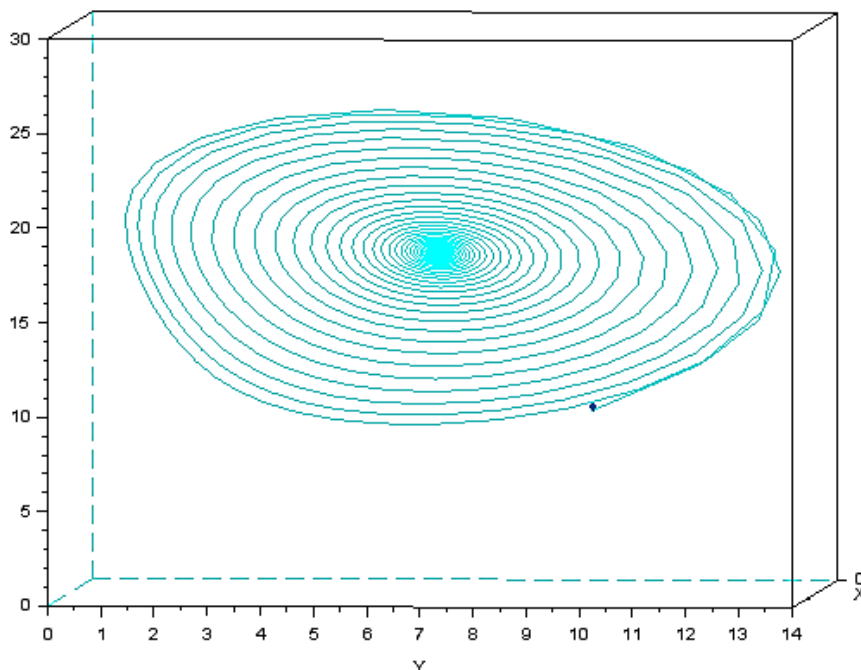


Рис. 2.17. Фазовая диаграмма при $b = 19$

Траектория начинается при значениях $[10\ 10\ 10]$. Далее траектория спирально приближается к центру кривой, что соответствует устойчивому состоянию системы.

Для решения при $b = 22$ фазовая диаграмма представлена на рис. 2.18:

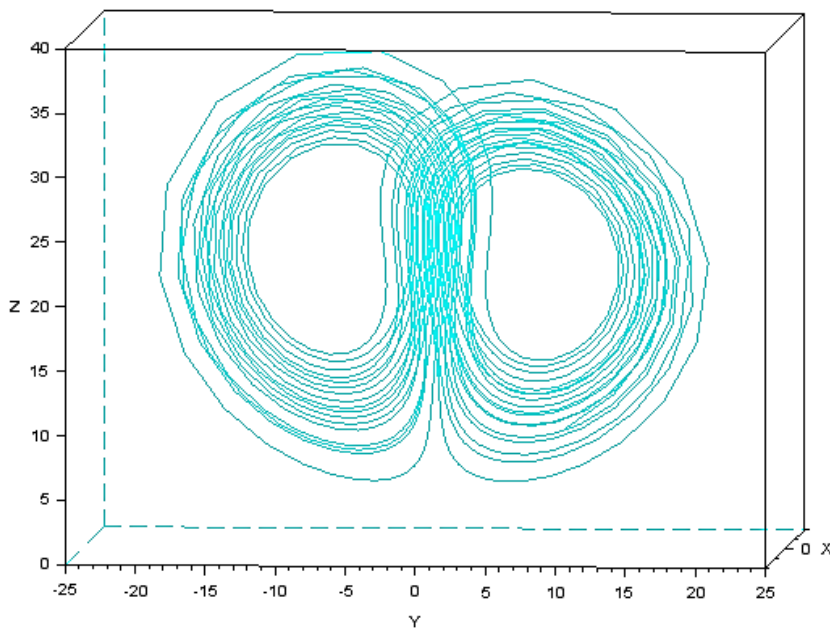


Рис. 2.18. Фазовая диаграмма при $b = 22$

Траектория асимптотически приближается к неустойчивым предельным циклам, которые и называются аттрактором Лоренца.

Приведенный выше пример показывает, что в детерминированных системах, описываемых достаточно простой системой дифференциальных уравнений, решение которой позволяет однозначно предсказывать будущее, может возникать стохастическое (случайное) поведение решения. В связи с этим становится очевидным, что возможность прогноза в одной и той же системе может быть различная, и во многих системах существует **горизонт прогноза** — отрезок времени, по завершению которого прогноз поведения системы, а следовательно, и прогноз чрезвычайной ситуации, становится невозможен. Состояния системы, в которых может быть сделан достоверный прогноз, принято называть **руслами**, а состояния, в которых прогноз сделать трудно или даже невозможно, — **джокерами** [Владимиров В.А. и др., 2000].

Модель брюсселятора. Модель брюсселятора — это модель химического реактора, который использовался в исследованиях, проводившихся под руководством И. Пригожина и удостоенных Нобелевской премии по химии 1977 г.

Название «брюсселятор» связано с именем города Брюссель, в котором проводились работы. Модель описывает поведение реагентов в химической реакции при условии, что реагируют два вещества A и B , а в результате реакции получается два новых вещества D и E с образованием промежуточных веществ X и Y в соответствии со следующей схемой (излагается по работе [Курдюмов С., Малинецкий Г., 2010]):
 $A \rightleftharpoons X, B + X \rightleftharpoons Y + D, 2X + Y \rightleftharpoons 3X, X \rightleftharpoons E.$

Концентрации веществ A и B в реакторе поддерживаются постоянными, и некоторым образом удаляются вещества D и E , т. е. система является открытой. Если скорости обратных реакций ($k_{-1}, k_{-2}, k_{-3}, k_{-4}$) гораздо меньше скоростей прямых реакций (k_1, k_2, k_3, k_4), систему можно описать уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} &= A + X^2 \cdot Y - (B + 1) \cdot X + \frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \\ \frac{\partial Y}{\partial t} &= B \cdot X - X^2 \cdot Y + \frac{\partial^2 Y}{\partial r^2} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Для системы (2.7) очевидное решение — это $X = A, Y = B/A$. В этом случае правые части уравнений (2.5) становятся равными 0.

Если концентрация вещества B невелика (точка бифуркации в данном случае лежит где-то вблизи значения 1.5), то, независимо от начальных данных, через определенное время установятся концентрации $X = A, Y = B/A$. Оказывается, что такое замечательное решение (устойчивое стационарное, на которое независимо от начальных данных выходят изучаемые распределения параметров при небольших внешних воздействиях) есть у многих нелинейных систем. Оно получило название термодинамической ветви. Если зафиксировать начальные концентрации X, Y и увеличивать значение B , то мы увидим, что, начиная с некоторого критического значения B , происходит выход на немонотонные стационарные распределения концентраций, например такие, как показаны на рис. 2.19b.

На рисунке 2.19а начальные значения концентрации вещества X меняются от 0 до 2.5. Несмотря на это, концентрация вещества X быстро (уже при $t = 5$) приходит к устойчивому значению $X = A = 1$. При увеличении B до 2 поведение решения резко меняется. Возникает стационарное распределение концентрации, которое не меняется во времени, но изменяется по длине реактора.

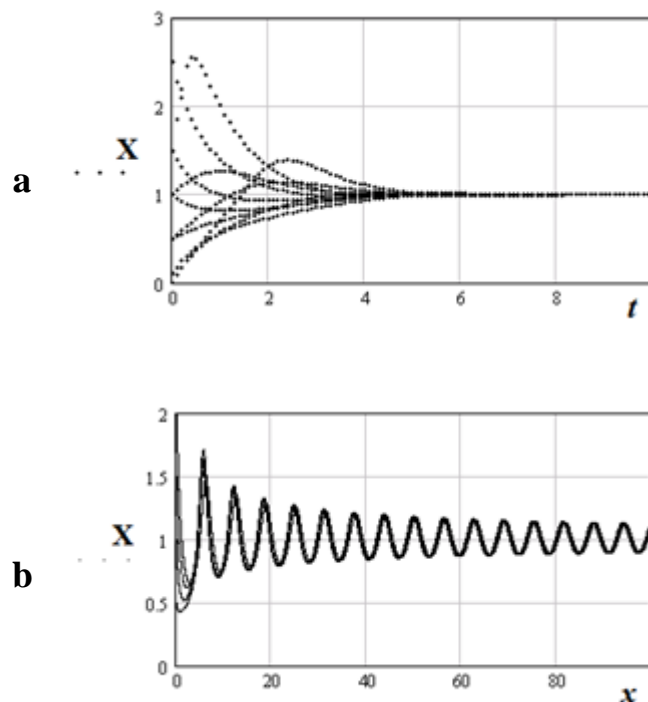


Рис. 2.19. Зависимость концентрации вещества X
 а - $A = 1$ и $B = 0.5$; б - $A = 1$ и $B = 2$

Построим фазовые диаграммы (зависимость концентраций реагирующих веществ друг от друга) для этих случаев.

Для стационарного решения (рисунок 2.20а) различные исходные значения концентраций быстро меняются и стягиваются в точку с концентрациями $X = A = 1$ и $Y = B = 0.5$. При $B = 2$ (рисунок 2.20б) возникает закономерно меняющееся во времени распределение концентрации продуктов X и Y . Соответственно, фазовая диаграмма стягивается не к точке (фокусу), а к некоторой фигуре (аттрактору). Такое распределение концентрации противоречит закону возрастания энтропии и возникает потому, что система реагентов является открытой: в нее, для того чтобы поддерживать в среднем постоянную концентрацию реагентов, добавляются реагирующие вещества и удаляются продукты реакции.

Модель брюсселятора отражает общие черты многих систем, где возникают структуры и возможны явления самоорганизации. Необходимые условия такого поведения обычно формулируют следующим образом [Курдюмов С., Малинецкий Г., 2010]:

1. Система является термодинамически открытой, т. е. возможен обмен энергией, веществом и т. д. с окружающей средой.

2. Макроскопические процессы происходят согласованно (кооперативно, когерентно). В рассмотренных нами примерах такое согласование обеспечивали диффузионные процессы.

3. Отклонения от равновесия превышают критическое значение, т. е. рассматриваются состояния, лежащие вне термодинамической ветви.

4. Процессы рассматриваются в таком диапазоне параметров, когда для их описания необходимы нелинейные математические модели.

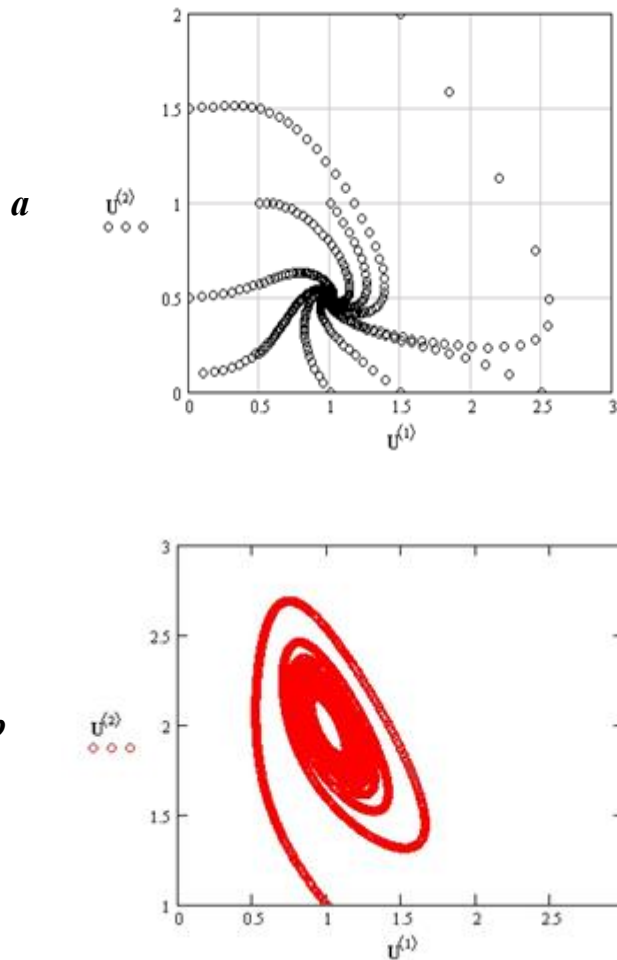


Рис. 2.20. Фазовая диаграмма для системы (2.7)

a - $A = 1$ и $B = 0.5$; **b** - $A = 1$ и $B = 2$

Исследования брюсселятора позволили всесторонне изучить важный вопрос, не имевший объяснения в физике начала XX века — вопрос об энтропии в живых системах. В соответствии с законами классической термодинамики энтропия, которая является мерой беспорядка (хаоса), должна увеличиваться. В то же время очевидно, что при эволюции живых организмов происходит постоянное усложнение систем и увеличение упорядоченности элементов этих систем, что сопровождается уменьшением энтропии. Исследование открытых систем с уменьшающейся энтропией (типа брюсселятора) позволило дать исчерпывающий ответ на вопрос, как это происходит.

3. Статистические модели

3.1. Использование статистики при моделировании систем

Модели, которые будут рассматриваться в этой главе, характеризуются уравнением $Y = f(X, b_i)$, которое может быть как одномерным линейным ($Y = b_1X$ или $Y = b_0 + b_1X$), так и нелинейным (многомерные задачи здесь для простоты не рассматриваются). Типичная задача моделирования заключается в установлении вида зависимости f и численных значений параметров b_i на основе статистического анализа двух выборок y_j и x_j , полученных в результате наблюдений или измерений. Обычно устанавливается зависимость некоторого индикатора от времени, и тогда результаты можно использовать для прогнозирования чрезвычайных ситуаций.

Вопрос об адекватности получаемой модели в данном случае зависит от того, с какой целью осуществляется экологическое моделирование. Рассмотрим два наиболее распространенных случая.

1. **Первый тип обратных задач** состоит в определении, на основе полученных экспериментальных данных, значений параметров в математических моделях, описывающих различные процессы, в природно-хозяйственных системах [Биненко В.И. и др., 2012]. Для такой задачи адекватность модели основывается на выполнении трех условий:

- подтверждении гипотезы о виде связи при статистическом анализе;
- устойчивости решения обратной некорректной задачи;
- воспроизводимости результатов решения обратной задачи.

В этом случае, кроме проверки статистических гипотез, устойчивость решения обратной задачи представляет главный интерес [Растоскуев В. В., 1997].

В общем виде обратная задача записывается операторным уравнением [Тихонов А.П., Арсенин В.Я., 1979]:

$$\hat{A} \cdot \vec{z} + \vec{e} = \vec{u} \quad (3.1)$$

где \hat{A} - известный оператор, действующий на вектор искомого решения \vec{z} , \vec{u} - вектор исходных данных, \vec{e} - вектор, характеризующий погрешность. Поскольку истинное значение вектора исходных данных неизвестно, найти точное решение невозможно. Приближенное решение задачи (3.1) называется устойчивым к малым изменениям исходных данных, если $\vec{z} \xrightarrow{x} \vec{z}_T$ при $\vec{e} \rightarrow 0$. Используя понятие расстояния, условие устойчивости можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \lim_{\vec{z}} \rho_z &= 0 \\ \rho_u &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

где $\rho_z = \left| \vec{z}_T - \vec{z}_e \right|$ и $\rho_u = \left| \vec{u}_T - \vec{u}_e \right|$ - расстояния, определенные на метрических пространствах решений (Z) и исходных данных (U). Результат прямого обращения

$$\vec{z} = \hat{A}^{-1} \cdot \vec{u} \quad (3.3)$$

может не удовлетворять условию (3.2), то есть малые изменения исходных данных могут приводить к неадекватно большим отклонениям решения.

Отталкиваясь от формального совпадения условия (3.2) и понятия "погрешность", определяемого как отклонение измеренного значения физической величины от истинного значения, было предложено использовать погрешность в качестве количественной меры устойчивости решения обратной задачи обработки данных локального и дистанционного мониторинга. При этом в качестве меры в пространстве U было предложено выбрать дисперсию, т.е. принять:

$$\rho_u = D_u \quad (3.4)$$

где величина D_u определяется соотношением:

$$D_u = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (u_T - u_i)^2 \quad (3.5)$$

где n - число элементов u_i в выборке исходных данных. Поскольку решение некорректной задачи тоже величина случайная, то пространству решений Z можно приписать такую же метрику:

$$\rho_z = D_z. \quad (3.6)$$

Тогда проверка условия (3.2) сводится к исследованию зависимости $D_z = f(D_u)$ для результата прямого обращения, то есть к анализу точностных характеристик полученного решения.

Если элементы вектора \vec{u} (u_1, \dots, u_k) являются независимыми, обратная задача при прямом обращении сможет быть описана зависимостями, характерными для косвенных измерений. При этом зависимость $D_z = f(D_u)$ определяется формулой:

$$D_z = \sum_{j=1}^k \left(\frac{\partial z}{\partial u_j} \right)^2 \cdot D_{u_j} \quad (3.7)$$

Зависимость (3.7) удовлетворяет условию (3.2), то есть, если дисперсия решения обратной задачи удовлетворяет уравнению (3.7), то это решение является устойчивым. При этом проверка устойчивости сводится к установлению статистического равенства ожидаемой дисперсии D_z , рассчитанной по формуле (3.7), и дисперсии D_{ze} , полученной в результате численных экспериментов над исследуемым алгоритмом в интересующем диапазоне изменения дисперсий исходных данных:

$$D_z = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (z_T - z_i)^2. \quad (3.8)$$

Для определения дисперсии решения методом Монте-Карло моделируются исходные данные u_{ij} с установленными дисперсиями D_{ij} и по формуле (2.3) рассчитываются решения z_i для i -ой реализации. Проверка выполнимости статистического равенства дисперсий и осуществляется с помощью критерия Фишера.

Можно использовать и более простую проверку статистического равенства дисперсий с помощью метода замещения, основанную на статистическом анализе свойств выборки A_i :

$$A_i = \frac{z_T - z_i}{z_T} \quad (3.9)$$

в интересующем диапазоне изменения дисперсий исходных данных. Следует отметить, что численное моделирование - это тот единственный случай, когда известны точные (модельные) значения решения и исходных данных. При обработке экспериментальных данных истинные значения измеряемых величин неизвестны, поэтому пользоваться формулами (3.7) - (3.9) для оценки устойчивости решения обратной задачи, строго говоря, нельзя. Однако для практических целей в этом случае в качестве "истинного" можно принять решение, определенное по формуле (3.3) для реальных экспериментальных данных, и по отношению к этому решению с помощью имитационного моделирования исследовать устойчивость решения обратной задачи. При моделировании формируются выборки со структурой погрешности, аналогичной той, которая реализуется в экспериментальных данных. Затем производится анализ зависимостей (3.7) - (3.9) описанным выше способом.

Таким образом исследование устойчивости решения обратной задачи в рамках предложенного подхода направлено на оценку составляющих погрешности, возникающих на стадии обработки данных, и выделение этих составляющих погрешности из суммарной погрешности результата измерений.

2. Второй тип обратных задач — это задачи по оценке параметров математических моделей при градуировке, когда по наблюдаемому значению сигнала требуется определить соответствующее ему значение аргумента (например, концентрацию примеси по наблюдаемому значению оптической плотности в фотометрии). Для этого типа задач (в метрологии они известны как задачи компарирования) погрешности определения параметров модели не играют существенной роли, а интерес представляют составляющие погрешности градуировочной зависимости, при этом решение обратной задачи относительно параметров модели может быть неустойчивым. Собственно, в этом случае и выбор вида модели f не играет принципиального значения — в качестве градуировочной зависимости без потери точности можно использовать кусочно-линейную или сплайн-аппроксимацию. Однако в этом случае особое значение приобретает проверка статистических гипотез о виде и параметрах распределений, которые лежат в основе оценки параметров. На первом этапе проверки формулируется гипотеза, которая проверяется с помощью того или иного статистического критерия (Стьюдента, Фишера и т. п.). Далее оценивается вероятность невыполнения исходной гипотезы. Обычно принимается [Справочник ..., 1989], что если эта вероятность больше 0.99, гипотезу следует отвергнуть, а если вероятность больше 0.95 и меньше 0.99, то гипотезу следует поставить под сомнение. Если вероятность меньше 0.95, отвергать гипотезу нет оснований.

В данном разделе на конкретных примерах объясняются практические приемы анализа статистических моделей с помощью пакета SciLAB.

Функции нормального распределения. В этом разделе приведена функция, которая позволяет рассчитать значение интеграла вероятности по заданному значению нормального отклонения. Интеграл вероятности представляет собой накопленную вероятность для функции нормального распределения (cumulative distribution function normal distribution) и определяется в пакете SciLAB с помощью функции: $[P, Q] = cdfnor("PQ", X, Mean, Std)$, где P - накопленная вероятность, Q - обратная величина ($Q = 1 - P$), "PQ" - определение режима вычисления, X - нормальное отклонение, $Mean$ - среднее арифметическое значение для нормального распределения, Std - среднее квадратичное отклонение.

Детали использования функции *cdfnor* иллюстрируется программой:

```
// Упражнение 3_2а = Нормальное распределение
m = 0; // среднее арифметическое
es = 1.0; // стандартное отклонение

// График функции нормального распределения
x = [-4: 0.1: 4]'; // Определение массива
[Y]=(1/(s*sqrt(2*pi)))*exp(-(x-m)^2/(2*s^2));
[P,Q]=cdfnor("PQ",x,m*ones(x),s*ones(x));
plot(x, Y, x, P)
xgrid()
xlabel('Функции нормального распределения','n','P');
legend('Плотность вероятности','Накопленная вероятность',2,%f);
```

В программе рассчитывается плотность вероятности нормального распределения и накопленная вероятность, которые выводятся на графике.

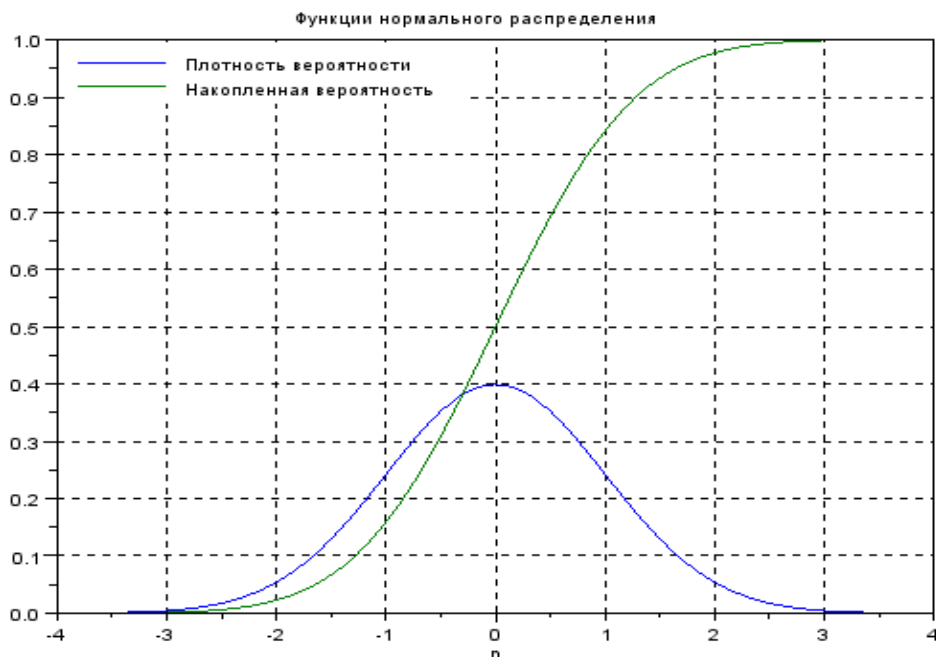


Рис. 3.1. Функции нормального распределения

Функция *cdfnor* в зависимости от того, какой режим вычислений установлен, позволяет рассчитывать разные величины: нормальное отклонение, среднее арифметическое значение, стандартное отклонение. В качестве примера в программе приведена оценка нормального отклонения. График, полученный в результате выполнения программы, показан на рис. 3.1.

Накопленные вероятности для приведенных ниже распределений рассчитываются по той же схеме, что и для нормального распределения. Поэтому соответствующие разделы написаны по возможности кратко.

Распределение хи-квадрат. Одним из наиболее важных классов распределений, функционально связанных с независимо определяемыми стандартными нормальными

распределениями, является распределение хи-квадрат. Обычно это распределение используется для реализации статистических критериев, таких как известный критерий согласия хи-квадрат, хи-квадрат квантилей других распределений, определяемых из распределения хи-квадрат.

Программа, позволяющая рассчитывать накопленную вероятность для распределения хи-квадрат для степени свободы $f=10$, приведена ниже, а соответствующий график - на рис. 3.2.

```
// Квантили распределения хи-квадрат
P = 0.1;
Q = 1.0 - P;
f = 10;
chi = cdfchi("X",f,P,Q) // 4.8651821
[P,Q] = cdfchi("PQ",chi,f) // 0.1 0.9
[Df] = cdfchi("Df",P,Q,chi) // 10

// построение графика
x = [0: 0.1: 3*f]'; // Определение массива
[P,Q]=cdfchi("PQ",x,f*ones(x));
plot(x, P)
xgrid()
```

Квантили распределения Стьюдента. Распределение Стьюдента используется прежде всего для оценки доверительных границ случайных распределений. Кроме того, это распределение применяется во многих статистических критериях, являясь одним из самых распространенных инструментов для проверки различных гипотез о выборочных распределениях.

Программа, позволяющая рассчитывать накопленную вероятность для распределения Стьюдента для степени свободы $f=10$, приведена ниже, а соответствующий график - на рис. 3.3.

```
// Квантили распределения Стьюдента
P = 0.95;
Q = 1.0 - P;
f = 10;
[t]=cdfT("T",f,P,Q) // 1.8124611
[P,Q] = cdfT("PQ",t,f) // 0.05 0.95
[Df] = cdfT("Df",P,Q,t) // 10
// построение графика

x = [-4.0: 0.05: 4]'; // Определение массива
[P,Q]=cdfT("PQ",x,f*ones(x));
plot(x, P)
xgrid()
```

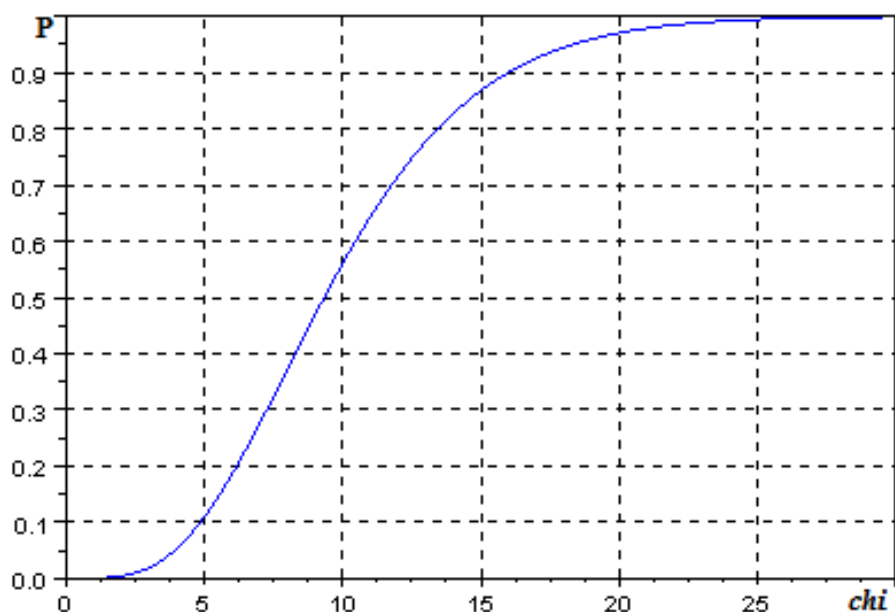



Рис. 3.2. Накопленная вероятность для распределения хи-квадрат.

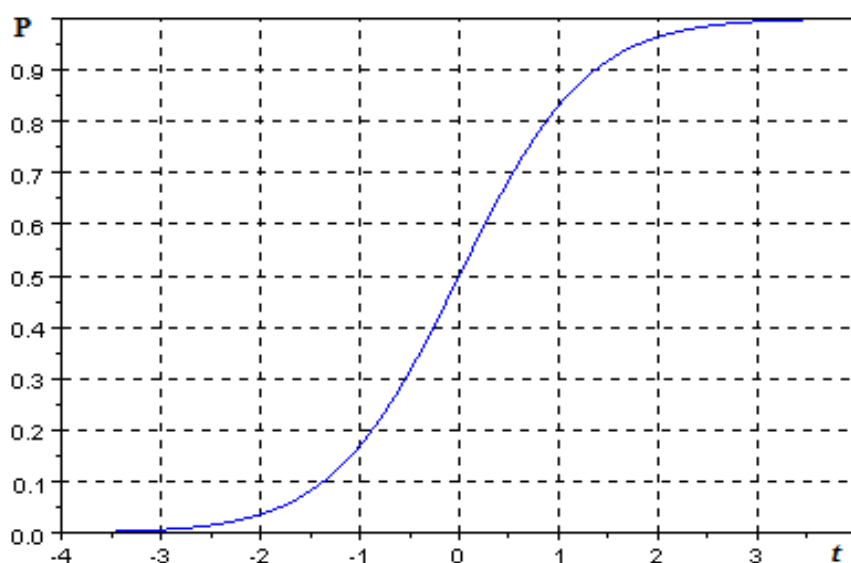


Рис. 3.3. Накопленная вероятность для распределения Стьюдента

Распределение Фишера. Один из наиболее широко используемых методов прикладной статистики — дисперсионный анализ - основывается на сравнении оценок дисперсий — взаимно независимых сумм квадратов. Такое сравнение осуществляется с использованием F-распределения (называемого также распределением Фишера), устанавливающего связь между отношением дисперсий и вероятностью выполнения гипотезы. С помощью этого распределения проверяется, например, гипотеза о равенстве двух дисперсий (критерий Фишера).

Программа, позволяющая рассчитывать накопленную вероятность для распределения Фишера для степени свободы $f=10$ приведена ниже, а соответствующий график - на рис. 3.4.

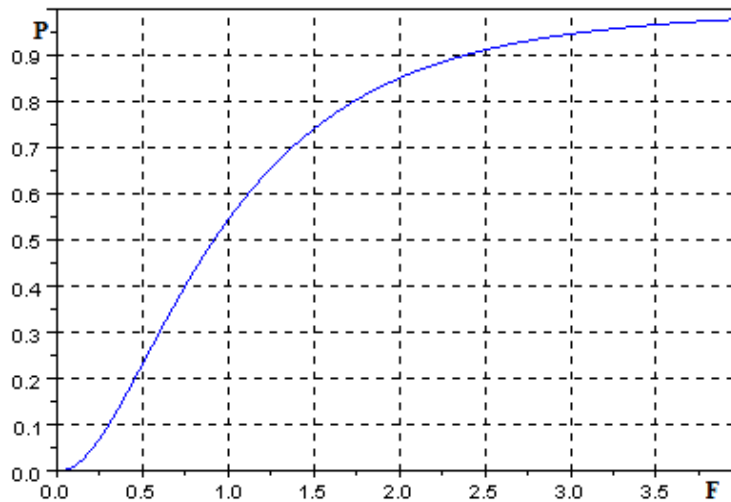


Рис. 3.4. Накопленная вероятность для распределения Фишера

```
// Квантили распределения Фишера
P = 0.99;
Q = 1.0 - P;
f1 = 5;
f2 = 12;
[F]=cdf("F", f1, f2, P, Q)
[P,Q]=cdf("PQ", F, f1, f2)
// построение графика
x = [0: 0.05: 4]'; // Определение массива
[P,Q]=cdf("PQ", x, f1*ones(x), f2*ones(x));
plot(x, P)
xgrid()
```

Проверка гипотезы о нормальном законе распределения. Одним из предположений, которое делается при анализе результатов наблюдений, является гипотеза о том, что наблюдаемые случайные величины подчиняются нормальному закону распределения. Это предположение используется как в регрессионном анализе, при установлении зависимостей между случайными величинами, так и в дисперсионном анализе, при проверке статистических гипотез. Поэтому выполнимость предположения о нормальности при обработке данных следует проверять [Растоскуев В. В., 1997].

Гипотеза о нормальном законе распределения включает в себя два предположения:

- 1) о виде распределения случайных величин;
- 2) о независимости случайных величин.

Первое из них проверяется с помощью так называемых критериев согласия, второе - с помощью критериев, проверяющих отсутствие сериальной корреляции. Здесь мы будем говорить только о первом предположении. Желающие узнать, как осуществляется проверка второго, могут обратиться к монографии [Растоскуев В. В., 1997].

При размере выборки больше 100 существует большое число критериев согласия - хи-квадрат, Пирсона, Колмогорова и другие. Значительно сложнее обстоит дело для небольших выборок с числом элементов меньших 100. В этом случае мощность критериев, характеризующая их способность выявлять отклонения эмпирического распределения от предполагаемого теоретического, резко падает, и для большинства выборок при

небольшом числе элементов гипотеза о нормальном законе распределения не отвергается, даже если выборка элементов осуществлялась из совокупности с заведомо другим законом распределения, например, равновероятным. С другой стороны, совсем отказаться от проверки предположения о нормальности для малых выборок нельзя, так как обработка выборок из генеральной совокупности с законом распределения, очень сильно отличающимся от нормального (например, с большой асимметрией), может привести к неправильным выводам.

В литературе по математической статистике отсутствует единое мнение о том, с помощью какого критерия целесообразно проверять гипотезу о законе распределения для малых выборок. В данной работе для проверки нормальности используется критерий, основанный на расчете эксцесса и асимметрии, рекомендованный в справочнике по прикладной статистике [Справочник ..., 1989]. Этот критерий, в отличие от других критериев согласия, позволяет проверять гипотезу при малом ($n > 3$) числе наблюдений.

Для проверки нормальности по значениям эксцесса и асимметрии используется критерий Стьюдента. Его использование основывается на том, что при нормальном законе распределения исходной выборки можно считать, что эксцесс и асимметрия также имеют нормальные выборочные распределения, причем математическое ожидание каждого из них равно нулю. В этом случае достаточно проверить, что отношения абсолютных значений оценок эксцесса и асимметрии к значениям соответствующих средних квадратических отклонений (стандартных ошибок) не превышает теоретического значения распределения Стьюдента для установленной доверительной вероятности.

Стандартная ошибка асимметрии определяется формулой:

$$S_{as} = \sqrt{\frac{6(n-1) \cdot n}{(n-2) \cdot (n+1) \cdot (n+3)}} \quad (3.10)$$

Стандартная ошибка эксцесса:

$$S_{ex} = \sqrt{\frac{24n(n-1)^2}{(n-3) \cdot (n-2) \cdot (n+3) \cdot (n+5)}} \quad (3.11)$$

Абсолютные значения асимметрии и эксцесса делятся на соответствующие значения стандартных ошибок, и большее из полученных значений сравнивается с правосторонним t -распределением Стьюдента.

Программа для проверки гипотезы о нормальном законе распределения представлена ниже:

```
// NTest4 - Проверка нормальности на основе оценок асимметрии и
// эксцесса
// Тест [Растоскуев В.В., 1977] с. 196 - 206
x=[16 19 19 19 20 20 21 21 21 23 23 23 24 24 25 25 25 25 25 25
25 25 25 25 25 25 26 26 26 26 27 27 27 27 27 27 27 28 28 28 28
29 29 29 29 29 29 29 29 29 30 30 30 30 30 30 30 30 30 31 31 31 31
31 31 32 32 32 32 32 32 32 33 33 33 33 34 34 34 34 35 35 35 35
36 36 36 37 37 37 39];

// Оценки асимметрии и эксцесса
m1 = mean(x)
r = size(x);
```

```

ns = r(2);           // размер выборки = 90

// дисперсия
m2 = smoment(x,2); // 2-ой момент
k2 = m2/(1 -1/ns); // дисперсия
// асимметрия
m3 = smoment(x,3); // 3-ий момент
k3 = m3/((1-1/ns)*(1-2/ns));
as = k3/(k2^(3/2)); // асимметрия =

// эксцесс
m4 = smoment(x,4); // 4-ый момент
k4 = m4/((1-2/(ns+1))*(1-2/ns)*(1-3/ns))-3*m2^2/((1-2/ns)*(1-3/ns));
ek = k4/k2^2;       // эксцесс =

// Оценка стандартных ошибок асимметрии и эксцесса
m1 = 6*ns*(ns - 1); // .
m2 = (ns + 3)*(ns + 1)*(ns - 2); // .
s3 = sqrt(m1/m2);   // стандартная ошибка асимметрии

m1 = 24*ns*(ns - 1)^2; // .
m2 = (ns + 5)*(ns+3)*(ns-2)*(ns-3); //
s4 = sqrt(m1/m2);   // стандартная ошибка эксцесса

// Проверка нормальности по критерию Стьюдента
m1 = abs(as)/s3;    //
m2 = abs(ek)/s4;    //
if m1>m2 then
  [P,Q] = cdf("PQ",m1,ns-1);
else
  [P,Q] = cdf("PQ",m2,ns-1);
end
P // P = 0.8156082 - гипотеза о нормальности распределения
  // не может быть отвергнута

// Построение гистограммы
clf();
t = [15: 0.1: 45];
[Y]=(1/(s*sqrt(2*pi)))*exp(-(t-m)^2/(2*s^2));
plot(t,Y)
histplot(10,x,style=5)
legend(["Плотность распределения" "Гистограмма"]);

```

График, который получается в результате работы программы, приведен ниже на рисунке.

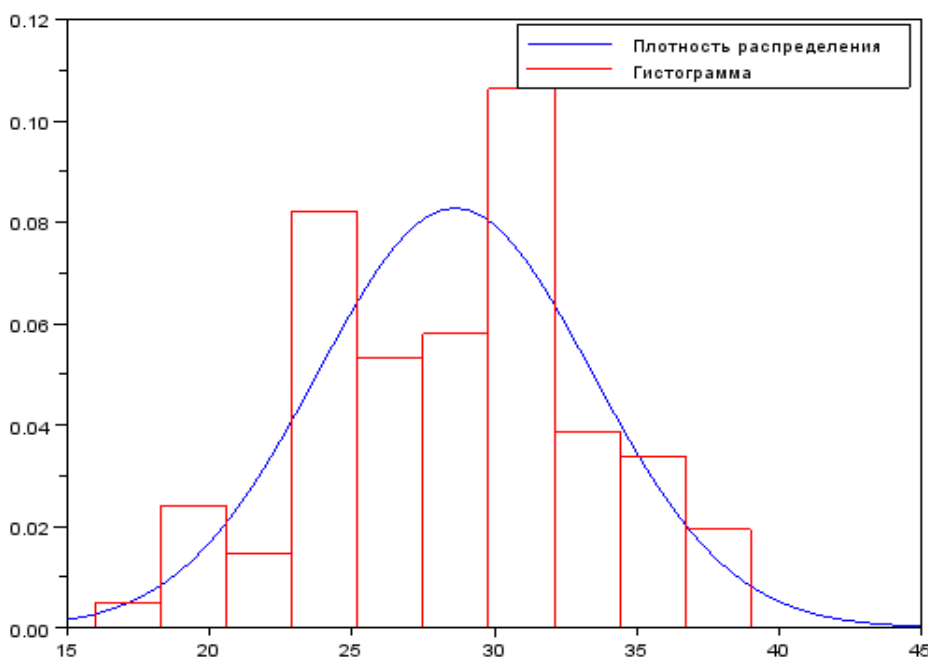


Рис. 3.5. Гистограмма и соответствующая плотность распределения

В вышеприведенной программе используется тест из книги [Справочник ..., 1989], использованный в монографии [Растоскуев В. В., 1997]. В результате работы программы получается результат: среднее арифметическое = 28.622222, вероятность = 0.8156082, что соответствует значениям, полученным в использованных для тестирования книгах (среднее арифметическое = 28.6222, вероятность = 0.8156). Таким образом, вероятность того, что выборка имеет распределение, отличное от нормального, равна 0.8156, и поэтому гипотеза о нормальности распределения не может быть отвергнута.

Сравним этот результат с тем, что получается для равновероятного распределения.

Для этого с помощью нижеприведенной программы сформируем выборку с равновероятным распределением:

```
// Формирование модельной выборки x
// Равновероятное распределение, интервал = 10
n=90; // размер выборки
y=25 + 10*rand(1,n,'uniform');
for i=1:n
    printf(" %2.0f",y(i));
end
```

В этой программе формируется выборка с равновероятным законом распределения (модификатор 'uniform') в интервале от 25 до 35:

```
x = [28 32 32 30 26 34 26 31 30 26 30 34 34 31 34 28 33 31 34 34
28 29 26 30 30 28 34 26 28 32 27 28 34 29 25 26 27 26 32 27 32
30 34 31 27 29 30 32 29 30 26 34 26 25 33 29 31 33 26 26 28 33
26 29 32 26 31 27 34 30 32 34 33 30 34 34 32 32 32 30 28 27 31
32 31 29 28 35 32 27];
```

Проверка нормальности на основе оценок асимметрии и эксцесса с помощью вышеприведенной программы дает результат: среднее арифметическое = 30.022222, вероятность = 0.9918614. Такое значение вероятности побуждает сделать вывод о том, что

гипотеза о нормальности распределения должна быть отвергнута. Соответствующая гистограмма показана на рисунке.

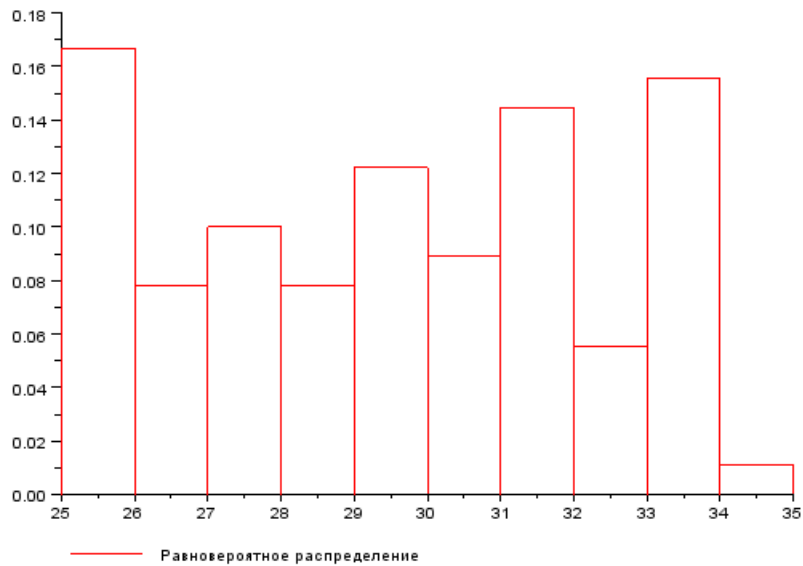


Рис. 3.6. Гистограмма для выборки с равновероятным распределением

3.2. Линейный регрессионный анализ

В данном разделе изучаются способы анализа линейных моделей с помощью пакета SciLAB. Линейные модели ($Y = b_1X$ или $Y = b_0 + b_1X$) являются очень распространенными в эколого-экономических исследованиях. Обычно их используют на ранних стадиях исследований, когда для перехода к более сложным моделям нет достаточных оснований.

Линейный регрессионный анализ без повторных наблюдений. Это простейший случай, который, тем не менее, встречается очень часто, так как после линеаризации к нему сводятся многие экономические и экологические задачи. Задача заключается в оценке параметров b_0 и b_1 , основываясь на двух выборках исходных данных x_i и y_i . В данном разделе соответствующие функции пакета SciLAB тестируются с помощью примера из книги Д. Химмельблау. Исходный массив из 20 чисел был получен добавлением случайных чисел к значениям $y=10+0.2 \cdot x$ [Химмельблау Д., 1973]. Фактически массив состоит из 5 серий по 2 параллельных наблюдения, но в данном разделе наличие параллельных наблюдений никак не используется.

Программа, обеспечивающая оценку параметров модели $Y = b_0 + b_1 \cdot X$, приведена ниже:

```
// Линейный регрессионный анализ без повторных наблюдений.
// Исходные данные
x = [10 10 20 20 30 30 40 40 50 50];
y = [12.05 11.48 12.59 15.82 17.35 16.42 16.24 17.05 20.56
19.28];
// параметры регрессии b(1)+b(2)*t
b = regress(x,y)
// построение графика
t = [0:0.5:60];
plot(t, b(1)+b(2)*t, x, y, 'ro')
xgrid()
```

Модификатор 'ro' определяет цвет (красный) и условные знаки, с помощью которых на график выводятся исходные данные:

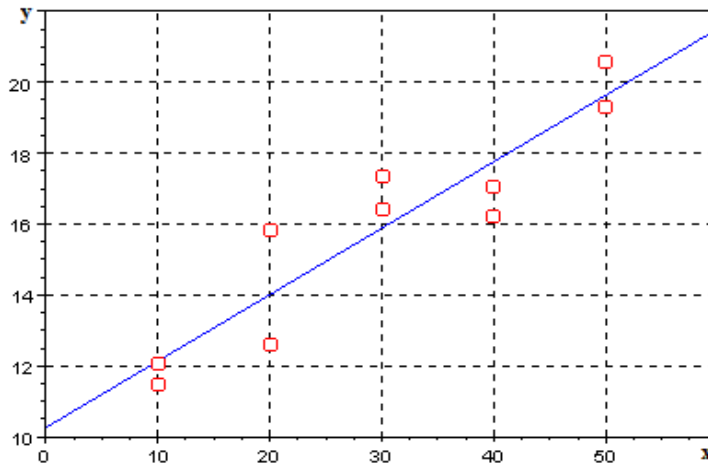


Рис. 3.7. Оценка параметров линейной регрессии без повторных наблюдений

КОМПЕТЕНТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАНИЯ

Линейный регрессионный анализ без повторных наблюдений с тестированием.

В этом разделе обсуждается программа, ориентированная на линейный регрессионный анализ без повторных наблюдений, с проверкой статистических гипотез, относительно параметров регрессии. В программе используется классический алгоритм из книги [Браунли, 1977, раздел 11.4, стр. 317]. Исходные данные x_i и y_i используются для оценки параметров модели $Y = \beta_0 + \beta_1 X$, где β_0 и β_1 — истинные значения параметров.

1. На первом шаге рассчитываются суммы:

$$S_x = \sum_{i=1}^k x_i, \quad S_y = \sum_{i=1}^k y_i, \quad S_{x^2} = \sum_{i=1}^k x_i^2, \quad S_{y^2} = \sum_{i=1}^k y_i^2, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^k x_i \cdot y_i \quad (3.12)$$

где k — число серий ($k = 18$), x_i — значения аргумента (независимая переменная), y_i — зависимая переменная.

В результате выполнения этой части программы получают значения:

$$S_x = 38\,970$$

$$S_y = 38\,255$$

$$S_{x^2} = 89\,394\,900$$

$$S_{y^2} = 86\,125\,825$$

$$S_{xy} = 87\,719\,100$$

2. На втором шаге рассчитываем величины:

$$\begin{aligned} SS_{x^2} &= \sum (x_i - \bar{x})^2 = \sum x_i^2 - \frac{(\sum x_i)^2}{k} \\ SS_{y^2} &= \sum (y_i - \bar{y})^2 = \sum y_i^2 - \frac{(\sum y_i)^2}{k} \\ SS_{xy} &= \sum (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y}) = \sum x_i y_i - \frac{\sum x_i \sum y_i}{k} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Получаем:

$$SS_{x^2} = 5\,024\,850$$

$$SS_{y^2} = 4\,823\,323,6$$

$$SS_{xy} = 4\,897\,025$$

Параметры двухпараметрической модели $Y = b_0 + b_1X$ оцениваются по формулам:

$$b_1 = \frac{S_x \cdot S_y - k \cdot S_{xy}}{S_x^2 - k \cdot S_{x^2}}, \quad b_0 = \frac{S_y - b_1 \cdot S_x}{k} \quad (3.14)$$

$$b_0 = 15,35228$$

$$b_1 = 0,974561$$

Параметр b однопараметрической модели $Y = bX$ рассчитывается по формуле $b = S_{xy}/S_{x^2}$

$$b = 0,9812540.$$

3. Оценки сумм квадратов. Суммы квадратов оцениваются для проведения дисперсионного анализа [Браунли, 1977, Раздел 11.3], ориентированного на вычисление дисперсий параметров b_0 и b_1 :

$$SS_{y^2} = \sum_{i=1}^k (y_i - y_m)^2$$

$$SS_{resid} = \sum_{i=1}^k (y_i - (b_0 - b_1 \cdot x_i))^2 \quad (3.15)$$

$$SS_{resid} = SS_{y^2} - SS_{reg}$$

Величина SS_{y^2} была рассчитана выше ($SS_{y^2} = 4823323,6$). Величина SS_{reg} называется "суммой квадратов, обусловленных регрессией" [Браунли, 1977] (формула 3.12), она определяется выражением $SS_{reg} = (SS_{xy})^2/SS_{x^2}$, величина SS_{resid} - суммой квадратов остатков или просто остатком (формула 3.13). В программе считаем сначала SS_{reg} , а затем по формуле $SS_{resid} = SS_{y^2} - SS_{reg}$ рассчитываем SS_{resid} .

Получаем:

$$SS_{y^2} = 4\,823\,323,6$$

$$SS_{reg} = 4\,772\,451,7$$

$$SS_{resid} = 50\,871,9$$

4. Оценка квадратов СКО.

Оценка остаточной дисперсии:

$$(S_{Y0})^2 = SS_{resid} / (k - 2) \quad (3.16)$$

Оценка дисперсии параметра b_1 :

$$S_{b1}^2 = \frac{S_{Y0}^2}{S_{x^2} - S_x^2 / k} \quad (3.17)$$

Оценка дисперсии параметра b_0 :

$$S_{b0}^2 = S_{Y0}^2 \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{(S_x / k)^2}{S_{x^2} - S_x^2 / k} \right) \quad (3.18)$$

Получаем:

$$(S_{Y0})^2 = 3179,49$$

$$S_{b1}^2 = 6,327\,53 \cdot 10^{-4}$$

$$S_{b0}^2 = 3142,493$$

5. Проверка гипотез относительно параметров

Коэффициент Стьюдента $t_p = 2,12$ для вероятности 0,95

Гипотеза $\beta_1 = 0$ - нет значимой зависимости Y от X

$(b_1 - 0)/\text{sqrt}(Sb12) = 38,74 > 2,12$ - гипотезу следует отвергнуть: $\beta_1 <> 0$ - значимая зависимость есть

Гипотеза $\beta_1 = 1$. Параметр $b_1 = 1$

$(b_1 - 1)/Sb12 = -1,012$ - гипотезу нельзя отвергнуть. Доверительный интервал для параметра $b_1 = t_p \cdot \text{sqrt}(Sb12) = 0,05333$. Границы доверительного интервала = (0,9212; 1,028)

Гипотеза $\beta_0 = 0$. Линия регрессии проходит через начало координат.

$(b_0 - 0)/\text{sqrt}(Sb02) = 0,274$ - гипотезу можно принять: $\beta_0 = 0$.

6. Доверительный интервал для результатов наблюдения:

$$\Delta_x = t_p \cdot S_{y0} \cdot \left(1 + 1/k + (x - x_m)^2 / SS_{x2}\right)$$

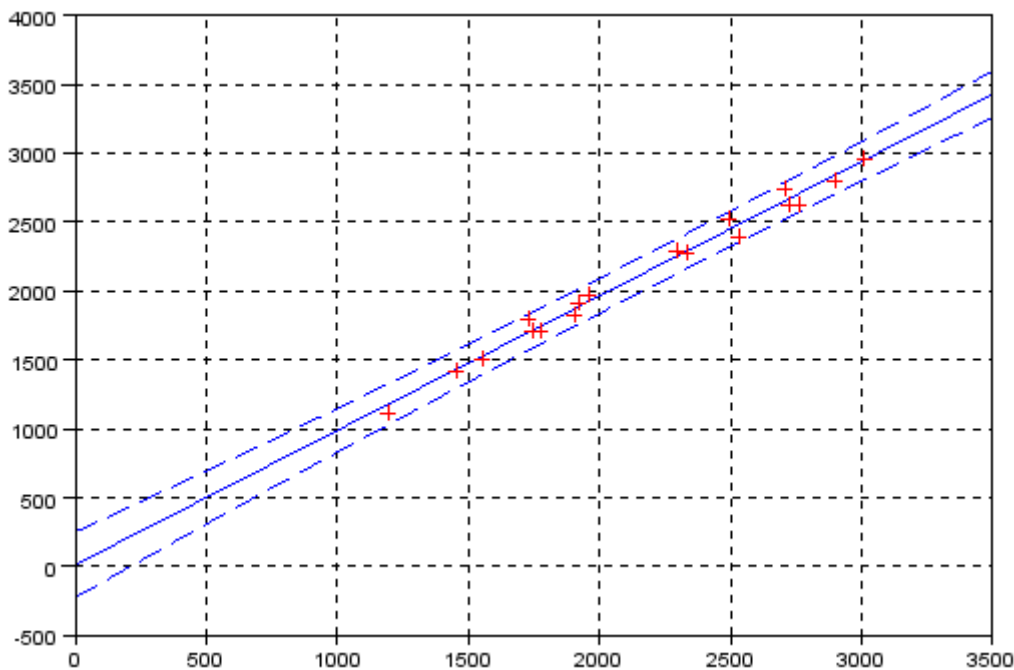


Рис. 3.8. Доверительный интервал для результатов наблюдения

Программа, реализующая вышеприведенный алгоритм, приведена ниже:

```
// Линейный регрессионный анализ без повторных наблюдений.
// Полное воспроизведение раздела 11.4 (с.318) из книги Браунли
// Исходные данные
x = [1190 1455 1550 1730 1745 1770 1900 1920 1960 2295 2335 2490
2720 2710 2530 2900 2760 3010];
y = [1115 1425 1515 1795 1715 1710 1830 1920 1970 2300 2280 2520
2630 2740 2390 2800 2630 2970];

// Шаг 1 (с.317) Считаем суммы:
[n, k] = size(y);
Sx = 0;
Sy = 0;
Sx2 = 0;
Sy2 = 0;
Sxy = 0;
```

```

for i=1:k
    Sx = Sx + x(i);
    Sy = Sy + y(i);
    Sx2 = Sx2 + x(i)*x(i);
    Sy2 = Sy2 + y(i)*y(i);
    Sxy = Sxy + x(i)*y(i);
end
Ym = Sy/k;
Xm = Sx/k;
// Шаг 2 (отклонения)
SSx2 = Sx2 - Sx**2/k;
SSy2 = Sy2 - Sy**2/k;
SSxy = Sxy - Sx*Sy/k;

// Шаг 2. Оценки параметров регрессии
b1 = (Sx*Sy - k*Sxy)/(Sx**2-k*Sx2); // для модели Y=b1+b2*x
b0 = (Sy - b1*Sx)/k;
b = Sxy/Sx2;

// Шаг 3. Оценки сумм квадратов
SSreg = SSxy**2/SSx2;
SSresid = SSy2 - SSreg;

// Шаг 4. Оценки квадратов СКО
SY02 = SSresid/(k-2);
Sb12 = SY02/(Sx2 - Sx**2/k);
Sb02 = SY02*(1/k + (Sx/k)**2/(Sx2 - Sx**2/k));

// Шаг 5. Проверка гипотез относительно параметров и
// Квантиль распределения Стьюдента
Df = k - 2;
P = 1 - 0.05/2; // P = 0.95
Q = 1 - P;
tp = cdf('T', Df, P, Q);
// гипотеза b1 = 0 - Нет значимой зависимости Y от X
tp1 = (b1-0)/sqrt(Sb12);
// гипотеза b1 = 1
tp2 = (b1-1)/sqrt(Sb12)
// Оценка доверительного интервала для b1
D2 = tp*sqrt(Sb12);
D21 = b1 - D2;
D22 = b1 + D2;
// Гипотеза beta0 = 0.
(b0 - 0)/sqrt(Sb02)
// Шаг 7. Построение графика для доверительного интервала
t = [0:5:3500];
s = size(t); // размер вектора t
len = s(2) // длина массива
yc = zeros(1, len);

```

```

yb = zeros(1,len);
yt = zeros(1,len);
for j=1:len-1
    yc(j) = b0+b1*t(j);
    yb(j) = yc(j) - tp*sqrt(SY02)*(1 +1/k + (t(j) - Xm)**2/SSx2)
    yt(j) = yc(j) + tp*sqrt(SY02)*(1 +1/k + (t(j) - Xm)**2/SSx2)
end
plot(t,yc,'b-', t, yb,'b--', t, yt,'b--', x,y,'r+')
xgrid()

```

Линейный регрессионный анализ с повторными наблюдениями. Гипотезу о линейности модели можно проверить, если есть повторные (параллельные) наблюдения в одной и той же точке. При этом следует учитывать, что линейный регрессионный анализ (модели $Y = b_1X$ или $Y = b_0 + b_1X$) основывается на четырех априорных предположениях, нарушение которых может нарушать адекватность модели:

- 1) о пренебрежении погрешностью аргумента X по сравнению с погрешностью функции Y ;
- 2) о равноточности измерений;
- 3) о виде связи между аргументом X и функцией Y ;
- 4) о нормальности распределения наблюдаемых значений y_{ij} .

Нарушение первого из этих предположений приводит к смещению оценок параметров регрессии, т. е. к систематическим погрешностям. Если погрешностью измерения аргумента нельзя пренебречь по сравнению с погрешностью измерения зависимой переменной, возникает «регрессионный парадокс»: уравнение прямой регрессии $Y = f(X)$ при обработке одного и того же массива не совпадает с уравнением обращенной регрессии $X = f^{-1}(Y)$. Для получения в такой ситуации несмещенных оценок применяют различные методы конфлюентного анализа, которые основываются на использовании априорной информации (или предположений) о соотношении между значениями погрешностей измерения X и Y . В действительности при измерениях редко приходится прибегать к тем или иным схемам конфлюентного анализа. Дело в том, что при нахождении градуировочной зависимости можно реализовать схему «контролируемой переменной» [Кендалл М.]. Для этого достаточно, чтобы значения аргумента были выбраны до начала экспериментов. При проведении экспериментов с повторными наблюдениями в сериях это условие выполняется автоматически. Как показывают теоретические исследования, в этом случае (даже при наличии погрешности X) смещения оценок не происходит.

Нарушение второго предположения регрессионного анализа — о равноточности измерений — тоже приводит к появлению систематических погрешностей. Классическая схема линейного регрессионного анализа ориентирована на то, что значение абсолютной погрешности постоянно во всем диапазоне концентраций. В действительности это не всегда так. Поэтому перед расчетом параметров уравнения регрессии должна быть проверена гипотеза о равноточности.

Эта проверка, как правило, осуществляется с помощью одного из двух критериев: критерия Кокрена (при постоянном числе наблюдений в серии) или критерия Бартлета (при переменном числе наблюдений). Если проверка с помощью этих критериев не позволяет принять гипотезу о равноточности, то для обработки экспериментальных данных необходимо использовать алгоритм взвешенной регрессии. В этом алгоритме каждой серии наблюдений приписывается некоторый вес, зависящий от случайной составляющей погрешности.

Если мы проверили первые три гипотезы (или по каким-то причинам считаем, что они выполняются), то гипотезу о виде связи между независимой переменной X и зависимой Y проверяют обычно с помощью критерия Фишера. Этот критерий основан на сравнении дисперсии остатков и суммы дисперсий параллельных наблюдений в сериях. Для его применения обязательны повторные (параллельные) наблюдения при одном и том же значении концентрации. В работе [Растоскуев В. В., 1997] был обоснован критерий - аналог критерия минимальной значимой разности [Себер Дж., 1980], по мощности близкий к критерию Фишера. В разработанной программе используются оба эти критерия.

Проверка гипотезы о виде связи (о линейности модели) осуществляется с помощью критерия Фишера при сравнении двух дисперсий:

- характеризующей отклонения внутри серий;
 - характеризующей отклонения относительно линии регрессии.
- 1) Оценка дисперсии, характеризующей отклонения внутри серий:

$$S_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p_i} (y_{ij} - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n p_i - n}, \quad (3.19)$$

- 2) Оценка дисперсии, характеризующей отклонения относительно линии регрессии:

$$S_r^2 = \frac{\sum_{i=1}^n p_i \cdot (Y_i - y_i)^2}{n - 2}, \quad (3.20)$$

где Y_i — расчетное значение зависимой переменной в серии $Y_i = b_0 + b_1 x_i$.

Отношение дисперсий $F_{re} = S_r^2 / S_e^2$ сравнивается с квантилем распределения Фишера.

Модифицированный критерий минимальной значимой разности предлагает проверять принадлежность точек линии регрессии доверительной зоне результата измерения в каждой серии. Эта процедура поясняется при анализе рис. 3.8.

// Линейный регрессионный анализ с повторными наблюдениями

// Исходные данные

x = [10.0 20.0 30.0 40.0 50.0];

y = [12.05 11.48;

12.59 15.82

17.35 16.42

16.24 17.04

20.56 19.28]';

// Оценка параметров модели $Y=b(1)+b(2)*X$

[n, k] = size(y);

ym = zeros(k); // Инициализация массивов

ska = zeros(k);

P = 0.95;

Q = 1-P;

[t]=cdf('T',n-1,P,Q) // коэффициент Стьюдента

for i=1:k // Предварительная обработка

s = 0;

s2 = 0;

```

for j=1:n
    s = s + y(j,i);
    s2 = s2 + y(j,i)*y(j,i);
end
ym(i) = s/n;
sko(i) = sqrt((s2 - s.^2/n)/(n - 1));
ts(i) = t*sko(i)/sqrt(n);
end
b = regress(x,ym')

// Построение графика
t = [0:0.5:60];
plot(t, b(1)+b(2)*t, x, ym, 'k+')
errbar(x,ym,ts,ts)
xgrid()

// проверка адекватности модели по критерию Фишера
fe = n*k - k
fr = k - 2
Se = 0;
Sr = 0;
for i=1:k
    Se = Se + sko(i)'.^2*(n-1);
    Sr = Sr + (b(1) + b(2)*x(i) - ym(i)).^2*n;
end
Se = Se/fe;
Sr = Sr/fr;
Fre = Sr/Se;
[P,Q]=cdf('PQ',Fre,fr,fe)

```

В результате выполнения программы получаются результаты:

```

t = 2.1318468 // коэффициент Стьюдента
fe = 20. // степени свободы
fr = 3. //
Se = 0.017908 // дисперсия по формуле (3.7)
Sr = 0.1345487 // дисперсия по формуле (3.8)
Fre = 7.5133274 // отношение дисперсий
P = 0.9985235 // вероятность невыполнения гипотезы о линейности.

```

Исходя из полученных результатов, гипотезу о линейности следует отвергнуть.

График полученной зависимости показан на рисунке 3.9. На рисунке доверительные интервалы для серий показаны вертикальными отрезками. Из рисунка видно, что несколько серий (1-я, 3-я, 5-я) не удовлетворяют модифицированному критерию минимальной значимой разности, что вынуждает (также как в случае критерия Фишера) отвергнуть гипотезу о линейности. Анализ рисунка позволяет сделать предположение, что гипотеза о линейности была отвергнута из-за неправильного выбора модели. Об этом свидетельствует то, что серии в середине диапазона (3-я, 4-я) лежат выше линии регрессии, а серии на концах диапазона (1-я, 5-я) - ниже. В данном случае необходимо использовать более сложную модель.

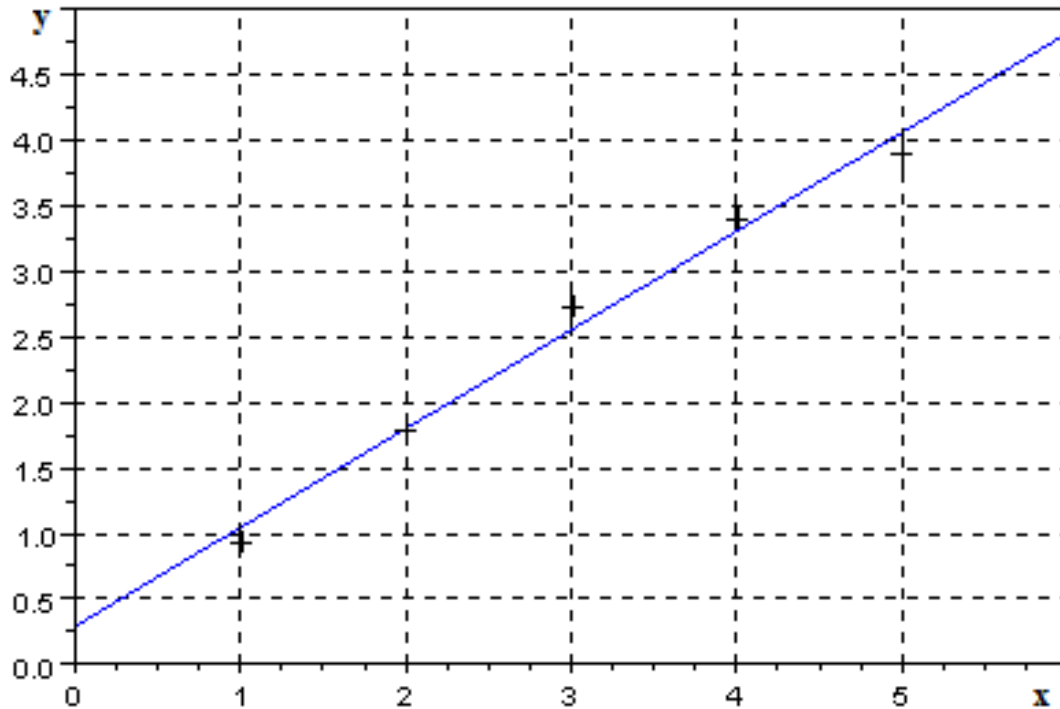


Рис. 3.9. Оценка параметров линейной регрессии с повторными наблюдениями

Вероятность выполнения гипотезы о линейности модели. Вероятность выполнения гипотезы о линейности модели зависит от соотношения случайной составляющей разброса и систематической составляющей, которая определяется отличием линейной модели от истинного уравнения. В этом разделе это заключение иллюстрируется сравнительно простым примером. Рассмотрим заведомо нелинейную модель $y(x) = 1.5 - e^{kx}$. На основе этой модели были сформированы массивы случайных чисел с нормальным распределением из 6 серий и 5 параллельных в серии. Всего для анализа было подготовлено 24 файла с 8-ю различными значениями среднего квадратического отклонения (СКО) — 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6 и 0.7. Эти файлы обрабатываются так, как это описано в предыдущем разделе. На рисунке 3.10 показаны некоторые результаты обработки данных. Тонкой линией на рисунке представлена исходная модель $z(t) = 1.5 \cdot e^{kt}$. Вертикальными отрезками показаны оценки СКО в сериях. Штрих-пунктирной линией показана линия регрессии $z = b_0 + b_1 t$. В данном случае гипотезу о линейности приходится отвергнуть, так как вероятность того, что эта гипотеза не выполняется, $P = 0,9962$. Вероятности невыполнения гипотезы о линейности для других значений исходного СКО отображены на рисунке 3.11. По оси абсцисс на графике приведены значения исходного СКО, а по оси ординат — соответствующие вероятности невыполнения гипотезы о линейности связи по критерию Фишера. Штрих-пунктирная линия проведена на уровне $P = 0,9$. Анализ приведенных данных показывает, что, начиная со значения исходного СКО = 0.3, эти вероятности, как правило, меньше 0.95, и гипотеза о линейности не может быть отвергнута. При этом стоит еще раз напомнить, что исходная зависимость $y(x) = 1.5 - e^{kx}$ заведомо нелинейна.

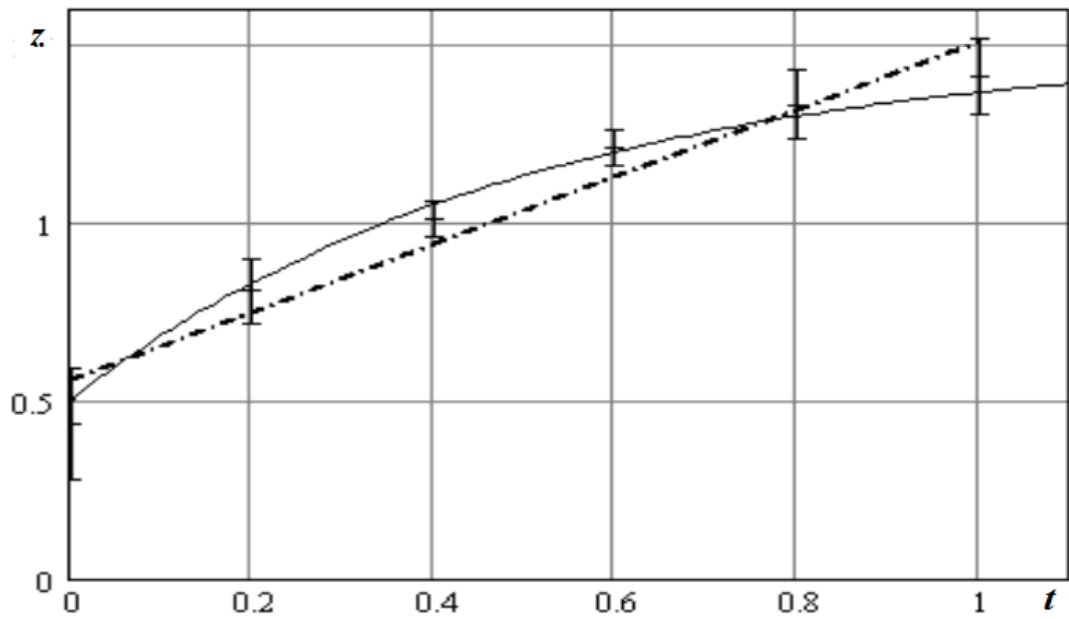


Рис. 3.10 Результаты обработки массива с исходным значением СКО $S = 0.1$

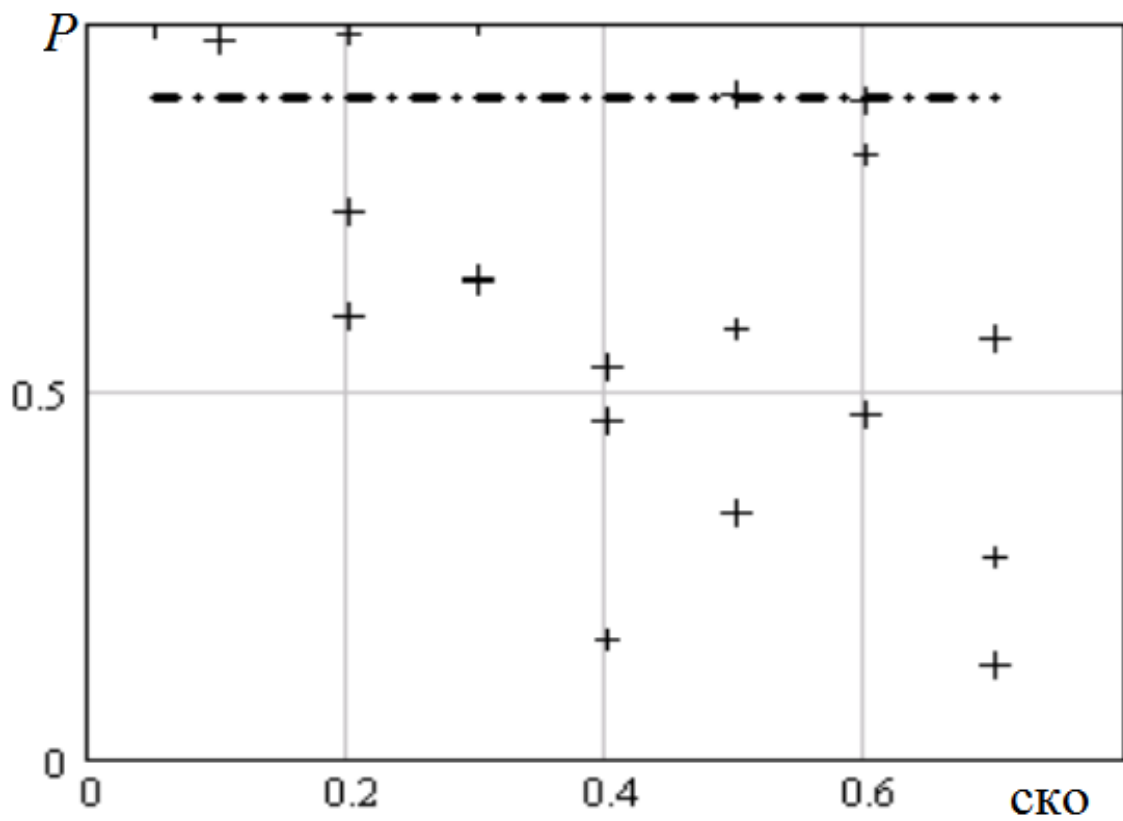


Рис. 3.11. Вероятности невыполнения гипотезы о линейности для различных значений исходного СКО

3.3. Нелинейный регрессионный анализ

Нелинейный регрессионный анализ направлен на оценку параметров (коэффициентов) b_i модели $Y = f(X, b_k)$ при обработке массива исходных данных. Обработка состоит в минимизации функционала невязки (при обработке экспериментальных данных - остаточной дисперсии). В задачах нелинейного регрессионного анализа (в отличие от задач линейного регрессионного анализа) особое внимание приходится уделять устойчивости решения обратных задач, т. к. функционал невязки может иметь несколько минимумов, и необходимо среди них найти глобальный минимум.

Функция Розенброка. Функция Розенброка: $y = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ является классическим примером для тестирования алгоритмов нелинейной регрессии [Химмельблау Д., 1975]. Минимальное значение этой функции равно нулю и достигается в точке [1 1]. Оценка параметров x_1 и x_2 осуществлялась с помощью программы, частично заимствованной из книги [Алексеев Е. Р., 2008]:

```
// функция Розенброка Z=100*(Y-X^2)^2+(1-X)^2
// решения X = 1 Y = 1
funcprot(0)
function y=fnRos(x) // функция Розенброка
    y=100*(x(2)-x(1)^2)^2+(1-x(1))^2;
endfunction
//формирование функции cst
function [f,g,ind]=cst(x,ind)
    f=fnRos(x);
    g=numdiff(fnRos,x);
endfunction
// Вызов функции optim
x0=[-2;2]; // Начальное приближение x0
[f,xopt]=optim(cst,x0)
// Построение графика функции Розенброка
[X,Y]=meshgrid(-2:.1:2,-1:.1:3);
Z=100*(Y-X.^2).^2+(1-X).^2; // точки нужны, чтобы выделить ^
xtitle('Z=100*(Y-X^2)^2+(1-X)^2');
mesh(X,Y,Z);
```

Оценка параметров для функции Розенброка осуществляется функцией `optim()`: `xopt = 0.9999955 0.9999910`, что достаточно точно соответствует исходным значениям: 1.00 1.00. Функционал невязки (остаточная дисперсия): $f = 2.010^{-11}$. График, отображающий зависимость остаточной дисперсии от значений параметров, показан на рисунке 3.12. Построение графика начинается с создания двумерного массива (функция `meshgrid()`), для элементов которого рассчитываются значения остаточной дисперсии. Эти значения откладываются по оси Z , формируя тем самым трехмерный график.

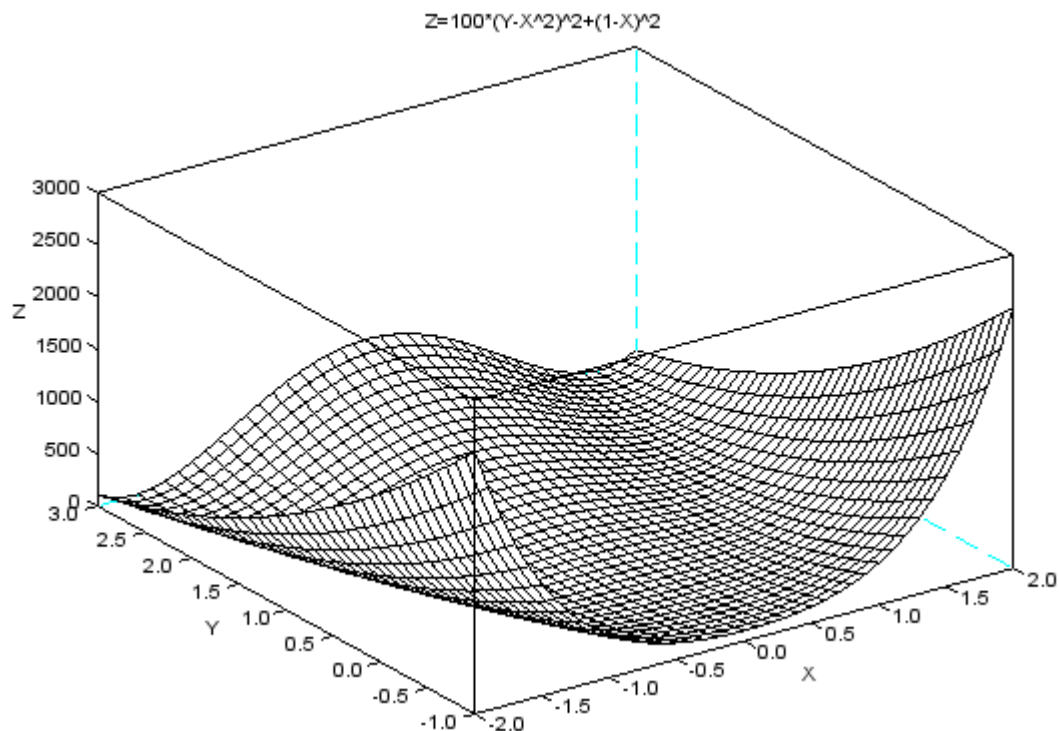


Рис. 3.12. Зависимость остаточной дисперсии от значений параметров

Кроме трехмерного графика с помощью функции `contour(x , y , z , nz)` строится контурный график, где x и y - векторы-строки значений, с числом элементов $n1$ и $n2$ соответственно; z - матрица размером $(n1,n2)$, содержащая значения рассматриваемой функции, либо объект-функция Scilab, определяющая поверхность $z=f(x,y)$, nz - значения уровней либо их количество. Соответствующая программа приведена ниже:

```
// Контурные графики
function f = fnRos ( x1 , x2 )
    f = 100*(x2 - x1**2)**2 + (1 - x1)**2;
endfunction
x = [-2:.1:2];
y = [-1:.1:3];
contour(x,y ,fnRos , [1 10 50 100])
xgrid()
```

График, формируемый этой программой, приведен на рисунке 3.13.

Векторы-строки заданы от -2 до 2 (x) и от -1 до 3 с шагом 0,1. Контурный график строится для 4 значений: 1, 10, 50, 100. Обращает внимание, что минимальные значения контурного графика имеют границу 1, при этом на графике наблюдается несколько локальных минимумов.

Если шаг уменьшить до 0.05 и ввести еще один контур со значением 0.1, получится график, приведенный на рис. 3.14.

```
x = [-2:.005:2];
y = [-1:.005:3];
contour( x , y , fnRos , [0.1 1 10 50 100])
```

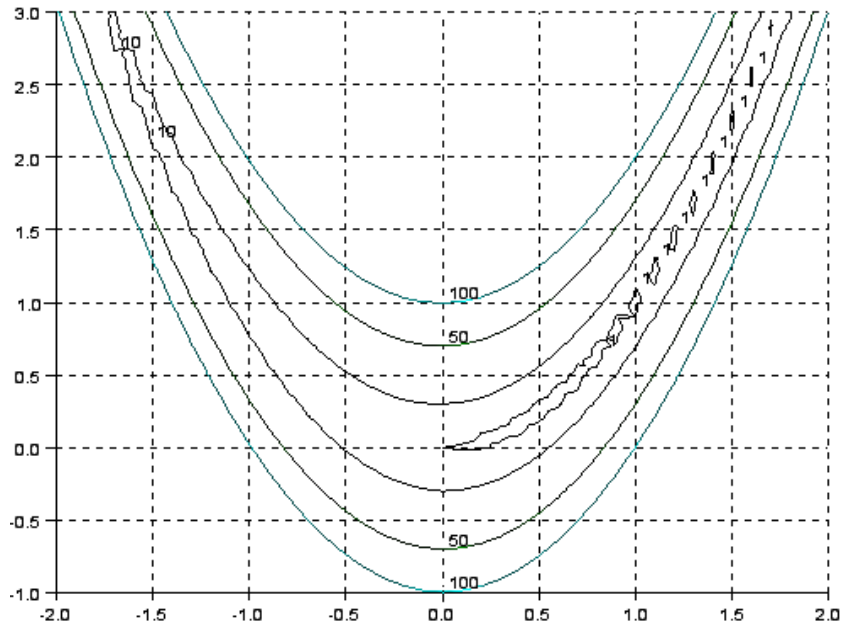


Рис. 3.13. Контурный график при шаге 0,1

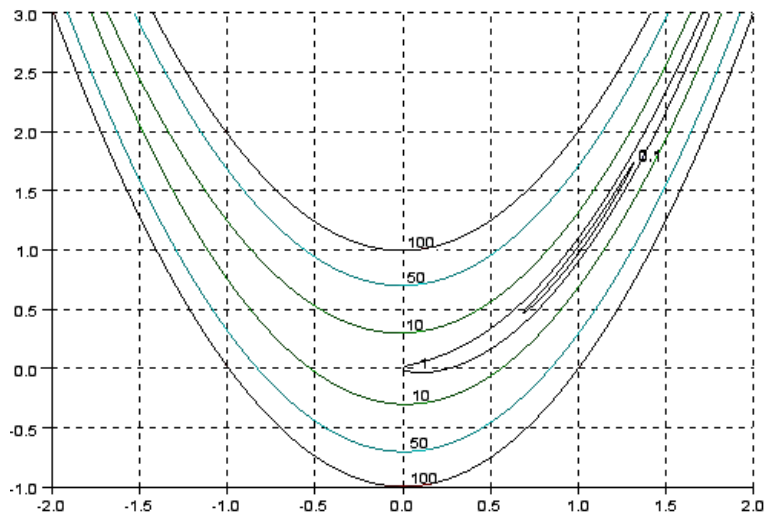


Рис. 3.14. Контурный график при шаге 0,05

Вид графика существенно изменился. Минимум с границей 1 сформировался в единый "желоб". Минимум с границей 0.1 тоже, на первый взгляд, не содержит локальных минимумов. В этом отношении утверждение о том, что функционал невязки может иметь несколько минимумов, приведенное в начале этого раздела, может быть не совсем верно, а определяться величиной шага.

Модель $Y=1.5-b_0 \cdot \exp(-b_1 \cdot x)$. Определить параметры модели при следующих исходных данных:

x1 = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1
 0.5104, 0.483, 0.5789, 0.5653, 0.5383
 0.8239, 0.8352, 0.8315, 0.8136, 0.8488
y1 = 1.07, 0.9718, 1.156, 1.002, 1.028
 1.135, 1.275, 1.16, 1.227, 1.212
 1.277, 1.191, 1.276, 1.26, 1.314

1.359, 1.318, 1.432, 1.396, 1.405

Данные получены с помощью генератора случайных чисел для исходной модели $Y=1.5-1 \cdot \exp(-2x)$.

Программа, обеспечивающая минимизацию остаточной дисперсии, приведена ниже:

```
// Поиск для зависимости  $y = 1.5 - b(1) \cdot \exp(-b(2) \cdot x)$   $b(1) = 1$ 
//  $b(2) = -2$ 
// Исходные данные
X1 = [0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1]';
Y1 = [0.5104, 0.483, 0.5789, 0.5653, 0.5383;
      0.8239, 0.8352, 0.8315, 0.8136, 0.8488;
      1.07, 0.9718, 1.156, 1.002, 1.028;
      1.135, 1.275, 1.16, 1.227, 1.212;
      1.277, 1.191, 1.276, 1.26, 1.314;
      1.359, 1.318, 1.432, 1.396, 1.405];
// предварительная обработка
[k1,n1]=size(Y1); // число серий и параллельных
Ym = zeros(k1,1);
for i=1:k1
    for j=1:n1
        Ym(i) = Ym(i) + Y1(i,j);
    end
    Ym(i) = Ym(i)/n1; // средние в серии
end
// функция для минимизации - остаточная дисперсия
funcprot(0)
b=[0;0];
b0=[0;0];
function S2=rvar(b) // residual variance
    S2 = 0;
    for j=1:k1
        y1(j)=1.5-b(1)*exp(b(2)*X1(j))
        S2 = S2 + (y1(j) - Ym(j)).^2
    end
endfunction
// подготовка вызова функции optim
function [f,g,ind]=cst(x,ind)
    f=rvar(x);
    g=numdiff(rvar,x);
endfunction
// Вызов функции optim
[f,хорт]=optim(cst,b0)
// Построение 3-х мерного графика
[X,Y]=meshgrid(-2:.1:2,-2.5:.1:2); // массив X Y
[n,k]=size(X); // число строк (n = 46) и столбцов (k = 41)
Z=zeros(n,k);
for m=1:n
    for l=1:k
        b(1) = X(m,l);
```

```

b(2) = Y(m,1);
Z(m,1) = rvar(b);
end
end

```

Оценки параметров выражаются значениями: 0.9692851 - 1.9065722 (точные значения: 1.0, 2.0) при остаточной дисперсии $f = 0.0015206$. График, отображающий зависимость остаточной дисперсии, от значений параметров показан на рисунке.

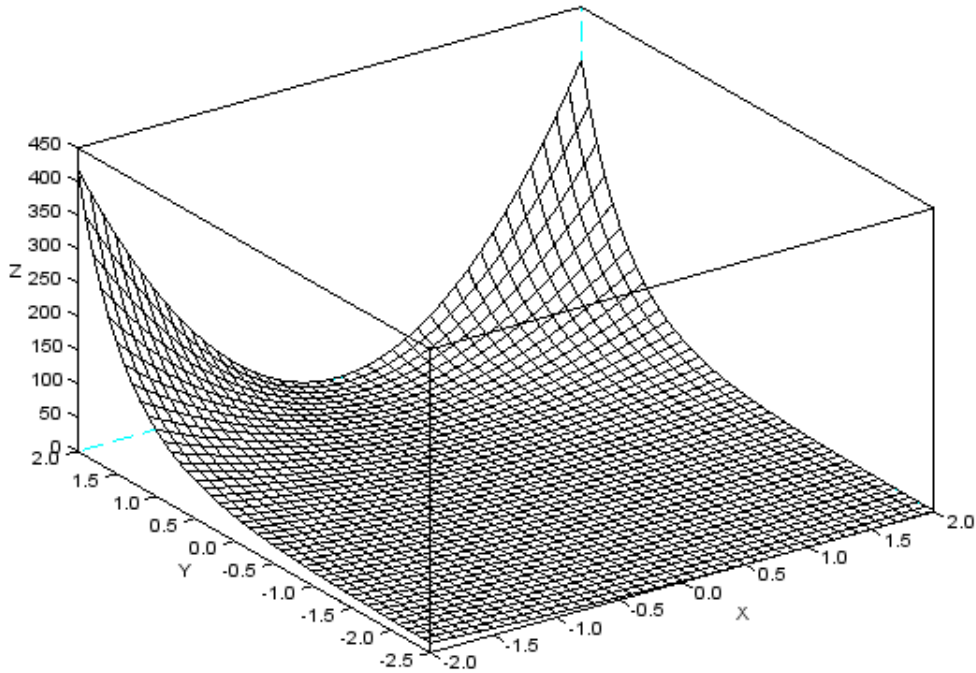


Рис. 3.15. Зависимость остаточной дисперсии от значений параметров

Контурный график при шаге 0,01 показан на рисунке:

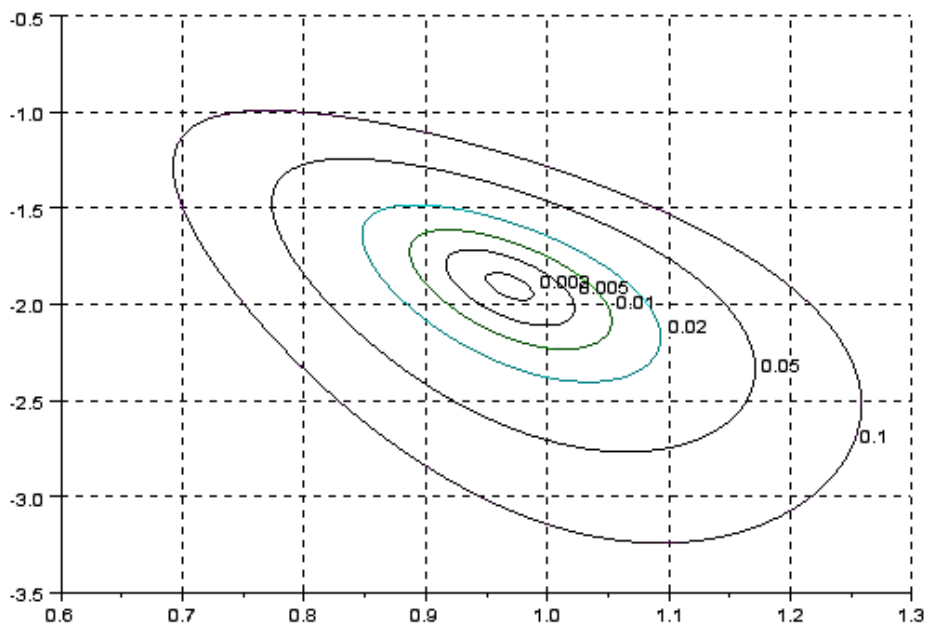


Рис. 3.16. Контурный график при шаге 0,01

Модель $Y = b_1X + b_2X^2$. Оценить параметры регрессии и построить график

Исходные данные:

X	Y	
1	0.9824016	0.9311520
2	1.6967264	1.7322033
3	2.4112592	2.8226668
4	3.0291323	3.2952031
5	3.4624087	3.6122716

Программа:

```
// Определить параметры модели Y=X-0.05*X^2
X1 = [1, 2, 3, 4, 5]';
Y1 = [ 0.9824016    0.9311520    0.9924161;
       1.6967264    1.7322033    1.7076074;
       2.4112592    2.8226668    2.4787687;
       3.0291323    3.2952031    3.2069877;
       3.4624087    3.6122716    3.8291516];

// предварительная обработка
[k1,n1]=size(Y1); // число серий и параллельных
Ym = zeros(k1,1);
for i=1:k1
    for j=1:n1
        Ym(i) = Ym(i) + Y1(i,j);
    end
    Ym(i) = Ym(i)/n1; // средние в серии
end
// функция для минимизации - остаточная дисперсия
funcprot(0)
b=[0;0];
b0=[0;0];
function S2=rvar(b)
    S2 = 0;
    for j=1:k1
        y1(j)=b(1)*X1(j)-b(2)*X1(j)**2
        S2 = S2 + (y1(j) - Ym(j)).^2
    end
endfunction
// подготовка вызова функции optim
function [f,g,ind]=cst(x,ind)
    f=rvar(x);
    g=numdiff(rvar,x);
endfunction
// Вызов функции optim
[f,хopt]=optim(cst,b0) // остаточная дисперсия
// Построение 3-х мерного графика
[X,Y]=meshgrid(-1:.1:2,-0.4:.1:0.4); // массив X Y
[n,k]=size(X); // число строк (n = 46) и столбцов (k = 41)
Z=zeros(n,k);
for m=1:n
    for l=1:k
```

```

b(1) = X(m,1);
b(2) = Y(m,1);
Z(m,1) = rvar(b);
end
end
mesh(X,Y,Z);

```

Оценки параметров выражаются значениями: 1.0053 0.0547 (точные значения: 1.0, 0.05) при остаточной дисперсии $f = 0.0105$. Трехмерный и контурный графики показан на рисунках 3.17 и 3.18.

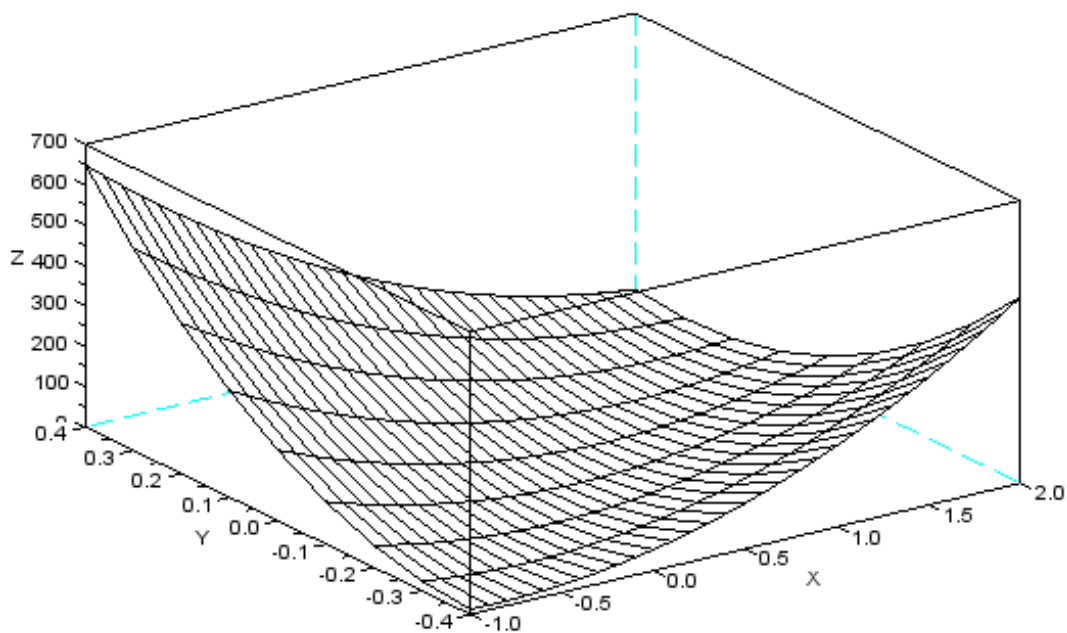


Рис. 3.17. Зависимость остаточной дисперсии от значений параметров

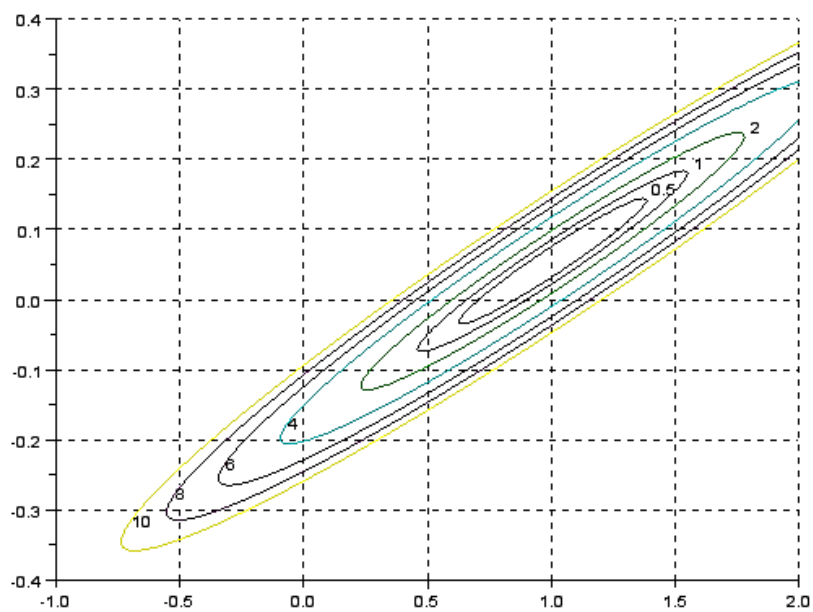


Рис. 3.18. Контурный график при шаге 0.02

Список использованных источников

1. *Акимов В. А., Лапин В. Л., Попов В. М., Пучков В. А., Томаков В. И., Фалеев М. И.* Надежность технических систем и техногенный риск. - М.: ЗАО ФИД «Деловой экспресс», 2002 - 368 с.
2. *Алексеев Е. Р., Чеснокова Е. А., Рудченко Е. А.* Scilab: Решение инженерных и математических задач. - М.: АН Linux; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 260 с.
3. *Аруцев А. А., Ермолаев Б. В., Кутателадзе И. О., Слуцкий М. С.* Концепции современного естествознания, 2008 - <http://www.philosophy.ru/edu/ref/kse/arucev/index.html>
4. *Биненко В.И., Донченко В.К., Растоскуев В.В.* Риски и экологическая безопасность природно-хозяйственных систем. Санкт-Петербург, СПбГУ, НИЦЭБ РАН, 2012. — 353 с.
5. Большая Советская Энциклопедия (БСЭ). – 3-е изд. – М.: Советская Энциклопедия, 1969 – 1978 гг.
6. *Браунли К.А.* Статистическая теория и методология в науке и технике. - М.: Мир, 1977. - 407 с.
7. *Ватульян А. О.* Математические модели и обратные задачи // Соросовский Образовательный Журнал. –1998. –№ 11. – С. 143–148.
8. *Владимиров В.А., Воробьев Ю.Л., Малинецкий Г.Г., и др.* Управление риском. Риск, устойчивое развитие, синергетика. – М.: Наука, 2000. – 432 с.
9. Всемирный банк, "Показатели мирового развития", 2011 - <http://www.google.ru/publicdata/directory>
10. *Глейк Дж.* Хаос. Создание новой науки. Изд-во: Амфора, 2001. – 398 с.
11. *Горбань А. Н., Хлебопрос Р. Г.* Демон Дарвина: Идея оптимальности и естественный отбор. – М: Наука, 1988. – 208 с.
12. ГОСТ Р 22.0.05-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Техногенные чрезвычайные ситуации. Термины и определения.
13. *Донченко В.К., Питулько В.М., Растоскуев В.В. и др.* Экологическая экспертиза. - 5-е изд. - М.: Изд. центр "Академия", 2010. - 528 с.
14. *Евстафьев И.Б., Григорьев С.Г.* К вопросу об оценке фоновый уровень риска. // Проблемы безопасности при ЧС. 1993. № 3. С. 3 – 19.
15. *Измалков В.И., Измалков А.В.* Техногенная и экологическая безопасность и управление риском. М.-СПб: 1998. — 482 с.

16. *Катица С. П.* Феноменологическая теория роста населения Земли // Успехи физ. наук. – 1996. – Т.166, вып.1. – С.63–80.
17. *Капра Ф.* Паутина Жизни. Новое научное понимание живых систем. – М.: «София», 2002. – 336 с.
18. *Кендалл М., Стьюарт А.* Статистические выводы и связи. □ М.: Наука, 1973. – 899 с.
19. *Кузьмин И.И., Шапошников Д.А.* Концепция безопасности: от риска “нулевого”- к риску “приемлемому”// Вестник РАН. 1994. т. 64, №5,. с. 402-408
20. *Курдюмов С., Малинецкий Г.* Синергетика – теория самоорганизации // Сайт С. П. Курдюмова, 2010 - <http://spkurdyumov.narod.ru/kurmsli.htm>
21. *Пайерлс Р.* Построение физических моделей // Успехи физ. наук. – 1983. – Т. 140, вып. 2. – С.315–332.
22. *Петросян Н. А., Захаров В. В.* Введение в математическую экологию. — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1986. — 222 с.
23. *Растоскуев В. В.* Экспертная система для обработки данных контроля загрязнений атмосферы. - СПб.: 1997. - 261 с.
24. *Растоскуев В. В.* Моделирование экологических систем: Учеб. пособие. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2012. – 80 с.
25. *Самсонов А.Ю.* Оценка современного состояния производственного травматизма и профессиональной заболеваемости в России // Нефтегазовое дело, 2006.
26. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ. - М.: Мир, 1980. - 456 с.
27. Справочник по прикладной статистике в 2-х т.: Под ред. Э.Ллойда, У.Ледермана - М.: Финансы и статистика, 1989. - 510 с.
28. *Тихонов А.П., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1979. - 286 с.
29. *Химмельблау Д.* Анализ процессов статистическими методами. - М.: Мир, 1973. - 960 с.
30. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. - М.: Мир, 1975. - 534 с.
31. *Baudin M.* Введение в Scilab (Перевод А. Глебова), 2010 - <http://forge.scilab.org/index.php/p/docintrotoscilab/>
32. Scilab manual. Ver. 5.2.2. - www.scilab.org/download/5.2.2/manual_scilab-5.2.2_en_US.pdf

Миссия университета – открывать возможности для гармоничного развития конкурентоспособной личности и вдохновлять на решение глобальных задач.

НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 20.04.01 ТЕХНОСФЕРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ

Интенсивный процесс интеграции России в мировое сообщество ведущих промышленно развитых стран мира явился причиной ускоренного развития в Российской Федерации передовых измерительных технологий. Особая роль при реализации измерительных технологий отводится оптико-электронным приборам, которые находят широкое применение в экологии, здравоохранении, топливно-энергетической, оборонной и других отраслях. Область профессиональной деятельности включает обеспечение безопасности человека в современном мире, формирование комфортной для жизни и деятельности человека техносферы, минимизацию техногенного воздействия на природную среду, сохранение жизни и здоровья человека за счет использования современных технических средств, методов контроля и прогнозирования. Цель магистерской программы – подготовка высококвалифицированных конкурентоспособных специалистов на современном уровне эффективно решать проблемы защиты окружающей среды и экологической безопасности с использованием широкого арсенала методов и подходов. Компетенции, получаемые студентами, полностью соответствуют ОС Университета ИТМО по направлению 20.04.01 – Техносферная Безопасность. Профессионально-специализированные компетенции, получаемые в ходе освоения программы, позволят студентам выполнять работы по метрологическому обеспечению и техническому контролю техносферной безопасности; использовать современные методы измерений, контроля, испытаний и управления качеством; участвовать в проведении сертификации продукции, технологических процессов, услуг, систем качества, производств и систем экологического управления предприятия; проводить мероприятия по профилактике производственного травматизма и профессиональных заболеваний, контролировать соблюдение экологической безопасности проводимых работ.

Конопелько Леонид Алексеевич, Растоскуев Виктор Васильевич, Кустикова
Марина Александровна, Банарь Светлана Александровна, Быковская Елена
Александровна, Магорова Александра Сергеевна

Математическое моделирование в техносферной безопасности

Учебно-методическое пособие

В авторской редакции

Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО

Зав. РИО

Н.Ф. Гусарова

Подписано к печати

Заказ №

Тираж

Отпечатано на ризографе