



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

ФАКУЛЬТЕТ ПОЧВОВЕДЕНИЯ

С. В. Мамихин

А. И. Щеглов

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЭКОЛОГИИ, РАДИОЭКОЛОГИИ И РАДИОБИОЛОГИИ

*Учебное пособие для студентов
факультета почвоведения МГУ*

МОСКВА
2020

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. ЛОМОНОСОВА
Факультет почвоведения

С. В. Мамихин, А. И. Щеглов

Имитационное моделирование в экологии, радиоэкологии и радиобиологии

Учебно-методическое пособие



Москва – 2020

УДК 004.942 + 504.054
ББК 32.973.202:28.071:28.080.1
М22

*Рекомендовано Учебно-методической комиссией
факультета почвоведения МГУ имени М.В. Ломоносова
в качестве учебно-методического пособия для студентов факультета,
обучающихся по стандартам МГУ, по направлению подготовки 05.03.06, 05.04.06
«Экология и природопользование»*

Рецензенты:

Т. А. Архангельская – д-р биол. наук, профессор кафедры физики
и мелиорации почв факультета почвоведения МГУ имени М. В. Ломоносова;
А. Н. Переволоцкий – д-р биол. наук, вед. научн. сотр.
ФГБНУ Всероссийский НИИ радиологии и агроэкологии

Мамихин С. В., Щеглов А. И.

М22 Имитационное моделирование в экологии, радиоэкологии и радиобиологии: учебно-методическое пособие для студентов факультета почвоведения МГУ / С. В. Мамихин, А. И. Щеглов. – Москва: МАКС Пресс, 2020. – 60 с.: илл.

ISBN 978-5-317-06302-3

В настоящем пособии приводятся теоретические и практические основы применения метода имитационного моделирования, практические задания, справочный и иллюстративный материал по курсам «Экологическая информатика» и «Математическое моделирование в радиобиологии и радиоэкологии» для студентов факультета почвоведения МГУ, обучающихся по направлению подготовки «Экология и природопользование».

Ключевые слова: экология, имитационное моделирование, радиоэкология, радиобиология, техногенное загрязнение.

УДК 004.942 + 504.054
ББК 32.973.202:28.071:28.080.1

Издание публикуется в авторской редакции

Учебное издание

МАМИХИН Сергей Витальевич
ЩЕГЛОВ Алексей Иванович

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЭКОЛОГИИ,
РАДИОЭКОЛОГИИ И РАДИОБИОЛОГИИ

*Учебно-методическое пособие для студентов
факультета почвоведения МГУ*

Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: Е. М. Бугачева
Обложка: М. А. Еронина

Подписано в печать 18.12.2019 г.
Формат 60х90 1/16. Усл. печ. л. 3,5. Тираж 100 экз. Изд. № 299.

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N 00510 от 01.12.99 г.
119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы,
МГУ им. М.В. Ломоносова, 2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495)939-3890/91. Тел./Факс 8(495)939-3891.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт»
115201, г. Москва, ул. Котляковская, д.3, стр. 13.

ISBN 978-5-317-06302-3

© Мамихин С. В., Щеглов А. И., 2020

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2020

Оглавление

Введение	4
Теоретические основы	6
Алгоритмы, алгоритмические системы. Алгоритмизация.	6
Типы моделей	11
Аналитические модели	12
Имитационные модели	12
Подтипы моделей	15
Ключевые моменты математического моделирования в экологии	16
Практика моделирования	17
Сбор исходной информации	17
Схема построения математических моделей	20
Реализация имитационных моделей	27
Вопросы для самоконтроля	35
Практические задания к спецкурсам «Экологическая информатика» и «Математическое моделирование в радиобиологии и радиоэкологии»	36
Миграционные модели	36
Комбинированные модели	42
Примеры структуры комбинированных моделей, построенных учащимися	44
Формулы расчета дозовых нагрузок	46
Радиобиологические модели	47
Приложения	52
Приложение 1. Соотношение между единицами СИ и внесистемными единицами в области радиационной безопасности	52
Приложение 2. Десятичные множители и приставки к единицам измерения	52
Приложение 3. Гамма-постоянные по мощности поглощенной дозы (G_D) и по мощности экспозиционной дозы (G_X) для некоторых радионуклидов	53
Литература	54
Словарь используемых терминов	56

Введение

Математическое моделирование в настоящее время признано одним из наиболее перспективных методов научного познания. Постоянно организуются конференции и симпозиумы, выходят периодические издания, посвященные развитию применения этого метода в фундаментальной и прикладной областях, осуществляются международные проекты, связанные с моделированием тех или иных процессов. Появляются новые лаборатории, институты и научно-исследовательские центры, специализирующиеся на исследованиях с использованием этого метода. В частности, ещё в 1992 г. в нашей стране на базе научно-исследовательского вычислительного центра АН СССР был организован Институт математического моделирования РАН, коллектив которого с успехом занимался решением различных научных и хозяйственных проблем.

Следует отметить, что математическое моделирование в биологии изначально было связано с биологической кибернетикой, которая представляет собой науку об общих закономерностях управления и связи в биологических системах, о процессах хранения, передачи и переработки информации в этих системах и способах ее кодирования. Основным методом исследования сложных систем в биокибернетике являлся метод вычислительных экспериментов на электронно-вычислительных машинах (ЭВМ) с использованием математических моделей. С течением времени математизация биологических исследований привела к возникновению в биокибернетике автономных направлений, в том числе и математической экологии.

В современной экологии метод математического моделирования используется очень широко. Математические модели служат эффективным средством для проведения исследований и прогнозирования экологических процессов. Следует однако заметить, что данная ситуация складывалась весьма не просто. Еще не так давно считалось, что поведение биологических объектов и процессы, происходящие в них, не сочетаются со строгой математической логикой. Развитие и широкое внедрение математических и вычислительно-информационных методов в современные биоло-

гические исследования сняли некогда дискуссионный вопрос о применимости математического моделирования в биологических науках, и математическое моделирование в настоящее время стало полноправным методом в биологии и сопредельных науках, в область интересов которых попадают биологические объекты и процессы.

Основное достоинство математического моделирования, как научного метода познания, состоит в возможности подмены реальных объектов их математическими аналогами, представляющими собой одно или несколько уравнений, описывающих в упрощенной форме отдельные процессы, компоненты или целостные объекты. Это позволяет проводить в численной форме на модели эксперименты, которые слишком трудоемки или невозможны при работе с системой – оригиналом или могут нанести значительные повреждения системе, чувствительной к внешнему воздействию. Математические модели используются для формализованного описания механизмов изучаемых процессов, проведения исследований, прогнозирования, реконструкции и т.д.

Цель настоящего пособия – дать представление учащимся о практических аспектах одного из наиболее широко применяемых в экологии типов математического моделирования, а именно – имитационного или иначе компьютерного моделирования.

Реализация моделей может быть осуществлена различными способами. Помимо непосредственного представления модели в виде собственной программы на каком-либо компьютерном языке, исследователь может, например, воспользоваться специализированными системами моделирования. Однако здесь сразу следует отметить, что специфика экологических систем и протекающих в них процессов такова, что такие программные продукты зачастую оказываются недостаточно гибкими. Поэтому идеальной, на наш взгляд, является ситуацией, когда эколог обладает навыками программирования и реализует модель (самостоятельно или с помощью более квалифицированного программиста) на каком-либо алгоритмическом языке. В данном пособии на конкретных примерах показано, как это осуществляется на практике.

Настоящее пособие содержит описание практических работ по курсам «Экологическая информатика» и «Математическое моде-

лирование в радиобиологии и радиоэкологии» для студентов факультета почвоведения МГУ, обучающихся по направлению подготовки «Экология и природопользование».

Для облегчения усвоения материала в конце приведен краткий словарь некоторых используемых терминов.

Теоретические основы

Алгоритмы, алгоритмические системы. Алгоритмизация.

Понятие алгоритма является на наш взгляд важнейшим для многих областей знаний и практической деятельности человека. Для имитационного моделирования, основанного на применении компьютера для решения систем уравнений, составляющих модель, – это еще и основополагающее понятие. Существует большое количество формулировок данного понятия, для начала приведем наиболее простое из них. **Алгоритм – это последовательность точно описанных операций, выполняемых в определенном порядке.** Отсюда вытекает необходимость существования некоторой среды, в которой выполняются алгоритмы. Логично называть данную среду алгоритмической системой. Такая система является набором средств и понятий, позволяющих строить множество алгоритмов, решающих различные задачи (Власов и др., 1988).

Алгоритмические системы определяются:

- 1) множеством входных объектов, подлежащих обработке алгоритмами системы;
- 2) свойствами исполнителя алгоритмов, т.е. набором тех действий, которые может выполнять исполнитель;
- 3) множеством, к которому могут принадлежать результаты выполнения алгоритмов;
- 4) языком, на котором формулируются алгоритмы, адресованные исполнителю.

В случае использования метода имитационного моделирования исполнителем является компьютер. В связи с этим возникает проблема коммуникации между заказчиком – человеком, который строит модель, и исполнителем – компьютером. Существует целый ряд способов решения данной проблемы на различ-

ных уровнях – от прямого общения с компьютером на машинно-ориентированном языке до использования специализированных программных пакетов для моделирования. Традиционным способом коммуникации в имитационном моделировании в настоящее время являются алгоритмические языки, т.е. специализированные языки записи алгоритмов для их реализации на компьютере, публикации или формального анализа, такие как тот же Бейсик, Си, Java, Pascal, FORTRAN и т.д. Мы будем рассматривать это далее как способы реализации моделей на компьютере.

Следует упомянуть такое понятие, как **алгоритмизация**, подразумевающее под собой процесс разработки алгоритма решения какой-либо задачи. В нашем случае это выливается в разработку упрощенных формализованных представлений об объекте моделирования и его поведении. В терминологии информационно-вычислительных технологий аналитика, важнейшего участника в группе разработчиков моделей, называли раньше специалистом по алгоритмизации.

Большое значение имеют свойства компьютера как исполнителя алгоритмов. Современные компьютеры в полной мере отвечают требованиям имитационного моделирования в экологии. При нехватке вычислительной мощности персонального компьютера можно воспользоваться услугами суперкомпьютеров или систем grid-вычислений.

Попробуем несколько расширить понятие алгоритма в приложении к экологическому имитационному моделированию и рассмотреть некоторые общие свойства алгоритмов, которые используются в этой области.

В моделировании сложных объектов, таких, как экологические системы, построение алгоритма является непременной составной процесса моделирования и всегда должно предшествовать построению модели. Правильно построенный алгоритм может представлять собой самостоятельную ценность как формализованное описание объекта моделирования, обобщение представлений о правилах его поведения. В случае недостатка информации, необходимой для построения модели, алгоритм может стать основой для проведения исследований по сбору недостающих данных.

Важнейшим свойством алгоритмов в экологическом имитационном моделировании является их **дискретность**, т.е. поша-

говый характер выполняемых вычислений. Это позволяет использовать изменяющийся ход вычислений в зависимости от их промежуточных результатов. Данное свойство может быть исключительно полезным, например, при отображении различных вариантов ответа экосистемы на воздействие каких-либо факторов.

Менее очевидна польза такого свойства алгоритмов, как **массовость**. Универсальные алгоритмы требуют исчерпывающего количества унифицированной исходной информации об объектах моделирования, что для экологии явление очень редкое. Данное свойство может быть использовано отчасти при моделировании относительно близких по характеристикам объектов.

Еще одним свойством алгоритмов, которое часто не реализуется в экологических моделях, является **однозначность**. Это свойство предполагает получение одинаковых результатов вычислений при введении одних и тех же исходных данных. Конечно, в экологии в основном используются детерминированные модели (см. далее), в которых используются однозначные алгоритмы, но иногда модели частично или полностью являются стохастическими и включают в себя какие-либо вероятностные элементы. Это позволяет отражать вероятностный характер экологических процессов.

Заканчивая данный раздел, обсудим дополнительно некоторые вопросы, касающиеся взаимоотношений моделей и алгоритмов. Если исходить из положения, что алгоритм – это не просто способ программной реализации модели, а совокупность правил, составляющих основу модели, по которым, как предполагается, ведет себя объект моделирования, то адекватность поведения модели дает основания полагать, что алгоритм, положенный в ее основу, формально близок к реальному поведению данного объекта и может быть использован для объяснения особенностей его функционирования. В ряде случаев это позволяет уточнить действительные механизмы рассматриваемых явлений – вычленивать значимые процессы, определить их направление и интенсивность, выявить доминирующие факторы, оказывающие влияние на поведение объекта, и т.д.

Данное положение в той или иной форме встречается у различных авторов, специалистов в области математического моделирования. Цитата для примера: “Математическая модель состоит из уравнения либо системы уравнений. Эти уравнения в коли-

чественном виде выражают предположения или гипотезы, сделанные в отношении реальной системы. Их решения позволяют получить значения, предсказываемые моделью. Модель, или более точно предположения, сделанные при построении модели, могут быть проверены путем сравнения предсказанных значений с результатами измерений на реальной системе. Математические уравнения модели ... выражают и интерпретируют гипотезы в количественной форме, давая возможность на основании результатов их анализа делать выводы об их правильности или ошибочности.” (Торнли, 1982).

На одном и том же алгоритме могут строиться модели, использующие различный математический аппарат, по-разному реализованные и обладающие, соответственно, разными функциональными возможностями. Это придает алгоритмам самостоятельную значимость и объясняет существование во многих отраслях знаний справочников и электронных библиотек алгоритмов различных явлений.

Математические модели различного типа являются ядром системного анализа, широкой стратегии научного поиска, использующего математический аппарат и математические концепции (Джефферс, 1981).

Место моделирования в системном анализе показано на Рис. 1. Подбирая необходимый тип модели, в наибольшей степени отвечающий поставленным целям и задачам, можно найти решение существующей экологической проблемы.

Обсуждая применимость имитационного моделирования в радиобиологии, следует учитывать сложность процессов, происходящих в живых объектах под воздействием ионизирующего излучения. Это позволяет утверждать, что имитационное моделирование в радиобиологии имеет многообещающие перспективы при решении разнообразных исследовательских и прогностических задач. Так реализации моделей, отнесенных Г.М. Обатуровым (1987) к “системным”, то есть рассматривающим радиобиологические эффекты одновременно на различных уровнях биологической организации, оказываются весьма эффективными в виде имитационных моделей.

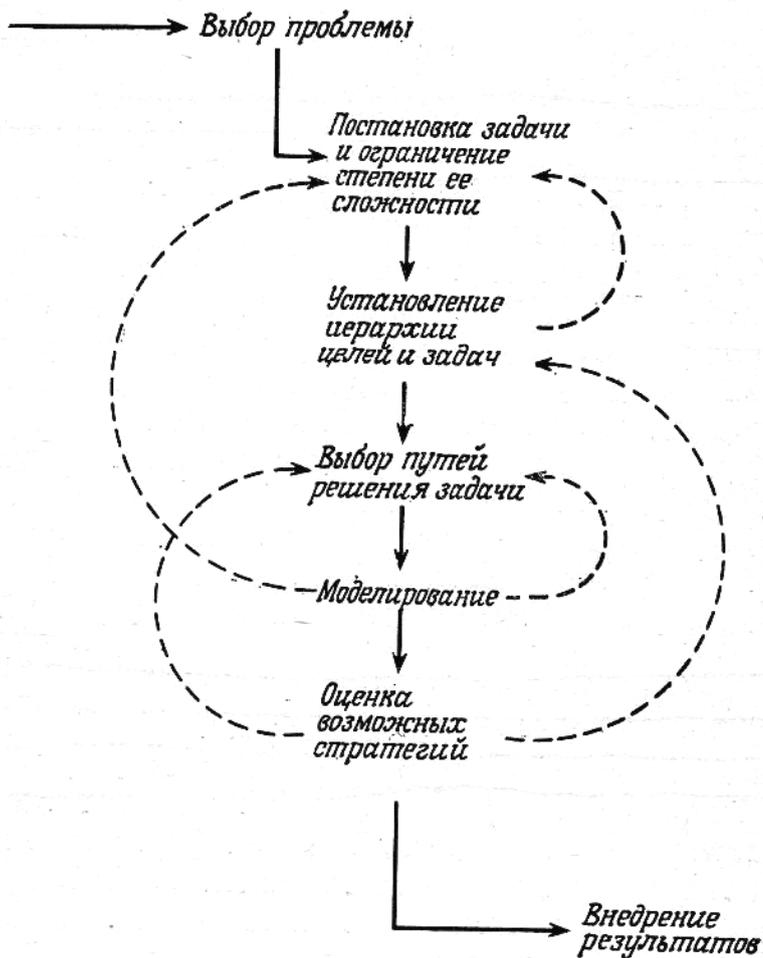


Рис. 1 Этапы системного анализа и их взаимосвязь (Джефферс, 1981)

Использование метода имитационного моделирования позволяет разбивать такие многофакторные процессы, как например, выживание клеток на ряд более простых процессов, параметры которых имеют конкретный биофизический смысл и могут быть получены в ходе специально поставленных экспериментов. В таких моделях удобно менять условия облучения и жизнедеятельности.

тельности изучаемых объектов, с легкостью переходить с одного уровня организации живой системы на другой (например, с молекулярного на органоидный, а далее на клеточный) и т.д.

Подобная модель может быть реализована в виде блоков, вложенных друг в друга и, в свою очередь, состоящих из отдельных компарментов, связанных между собой энергетическими, вещественными или информационными связями.

Такая форма реализации модели позволяет на различных временных этапах учесть специфику воздействия облучения на различные уровни организации живой материи, составляющей объект. Именно имитационное моделирование обладает необходимым аппаратом для рассмотрения в динамике одновременно двух тесно связанных между собой сложнейших процессов - передачи энергии ионизирующих излучений и лучевых повреждений отдельных компонентов и объекта в целом, происходящих в трехмерном пространстве.

Типы моделей

Для того чтобы понять специфику имитационного моделирования следует каким-то образом классифицировать модели. По способу реализации можно выделить два основных типа математических моделей, использующихся в естественных науках: **аналитические** (эмпирические) и **имитационные**. Если рассматривать наиболее простую математическую модель, в которой присутствует только одна переменная X , которая зависит от одного фактора t , то ее можно представить в следующем виде:

$X(t) = F(X_0, t)$, где F - некая функция, отражающая зависимость X от t .

При рассмотрении моделей, включающих более одной переменной, F является разрешающим оператором совокупности математических соотношений между переменными и факторами. В случае, когда для F найдено точное аналитическое выражение, позволяющее для любого начального условия X_0 определить значение переменной X для любого t , модель принято считать аналитической (Федоров, Гильманов, 1980).

Аналитические модели

В аналитических моделях действительные механизмы функционирования объектов моделирования и их компонентов либо совсем не рассматриваются, либо используются очень упрощенные представления о них. Подобные модели могут использоваться при рассмотрении отдельных процессов или простых биосистем, подверженных воздействию ограниченного числа факторов. Традиционно аналитические модели применяются для формализации представлений о механизмах изучаемых процессов и носят выраженный объяснительный характер. Модели этого типа обладают многими удобными с математической точки зрения свойствами, облегчающими их применение для изучения моделируемых объектов. В частности, они позволяют использовать весьма эффективные аналитические методы качественной теории дифференциальных уравнений, теории колебаний и теории бифуркаций. Подробное изложение общих принципов описания поведения биологических систем с помощью аналитических моделей, приемы и примеры качественного исследования различных биологических процессов можно найти во многих учебниках (например: Смит, 1976; Романовский и др., 1984; Рубин, 1999; Ризниченко, 2002 и др.).

При моделировании сложных систем нахождение аналитического выражения для разрешающего оператора F часто оказывается затруднительным или в принципе невозможным. В случае если соотношения между переменными и факторами не противоречат друг другу и их достаточно для нахождения решения, составляют на компьютере алгоритм численного решения уравнения или системы уравнений, формирующую модель. Оператор F реализуется в виде программы, с помощью которой по входным и начальным данным рассчитываются значения переменных модели. Такие модели называются имитационными, а иногда, по способу их реализации и не совсем точно, компьютерными.

Имитационные модели

Четкого общепринятого определения имитационных моделей не существует. В целом имитационные модели характеризуются следующими чертами:

- в основе лежит камерный (блочный) принцип, топологическая структура модели может быть отражена потоковой диаграммой;

- аналитически модели описываются системами дифференциальных или конечно-разностных уравнений;

- потоки между блоками формализованы уравнениями различной сложности, отражающими действительные механизмы процессов и позволяющие учитывать влияние как внешних, так и внутренних по отношению к системе факторов на прохождение процесса.

Таким образом, основа имитационного моделирования заключается в упрощенном графическом описании структуры объекта в виде потоковой диаграммы, написании системы уравнений, отражающих функционирование объекта с позиции такого упрощения, идентификации уравнений функций переноса и параметров, входящих в них, и реализации модели на компьютере, включая отладку программы и проверку работы модели. Все это предваряется и сопровождается сбором информации об объекте, необходимой для построения и проверки модели, и анализом ее поведения. Имитационные модели позволяют наиболее полно использовать всю имеющуюся информацию об объекте моделирования. Признано также, что имитационное моделирование является одним из самых эффективных методов количественного прогноза поведения сложных систем. Традиционным способом реализации имитационных моделей является написание программ на различных алгоритмических языках, которые затем вводятся в компьютер для дальнейшей работы с моделью. Такой способ реализации позволяет изменять ход вычислений в зависимости от промежуточного результата, что делает возможным учет влияния факторов самого различного характера, в том числе и модифицирующего, на объект моделирования и изменение в процессе вычислений его ответа на воздействие этих факторов. Это еще одна очень важная отличительная черта имитационного моделирования.

Имитационное моделирование в настоящее время является наиболее используемым в экологии типом математических моделей. Это обусловлено спецификой объектов исследования. Пояним на примере. Типичные объекты исследования в экологии – экосистемы характеризуются высокой гетерогенностью, состоят

из множества компонентов, связанных между собой и с окружающей средой взаимоотношениями различного характера (энергетические, вещественные и информационные). Изменения в одном из компонентов экосистемы, как правило, влекут за собой изменения в других. Экологические процессы динамичны в пространстве и времени, им присуща определенная неоднозначность поведения при одних и тех же условиях. Функционирование экосистем характеризуется явлениями запаздывания, кумулятивными эффектами, порогами, сложными нелинейными зависимостями и вероятностным характером процессов. Имитационное моделирование наиболее полно отвечает таким особенностям экосистем, как объектов моделирования, по принципам построения и реализации моделей.

Создание имитационных моделей целесообразно при наличии достаточных знаний об объекте моделирования и особенно эффективно при решении локализованных экологических проблем. Модели данного типа успешно используются на практике, например, для выбора оптимальной стратегии управления природными процессами при различных режимах хозяйственной деятельности. Ограниченная “глубина” прогноза имитационной модели искупается его точностью на временных интервалах, не сопровождающихся значительным качественным изменением экосистемы в том случае, когда модель достаточно надежна.

Следует отметить, что зачастую исследователи, столкнувшись с невозможностью окончательной реализации модели в аналитическом виде, пытаются решить проблему, прибегая к приемам имитационного моделирования, реализуя их в виде программы и просчитывая на компьютере. Но при этом следует учитывать разницу в изначальном подходе при создании аналитических и имитационных моделей. Те ограничения и запреты, которые накладываются в аналитическом моделировании, например на число переменных, на изменение величин параметров и вида функций и т.д., не могут быть полностью компенсированы даже при реализации аналитических моделей на компьютере. Возможна трансформация таких моделей в имитационные, поскольку реализация их на компьютере уже позволяет изменять ход вычислений, например в зависимости от получаемых результатов.

Широко распространенные в естествознании регрессионные модели, которые включают в себя уравнения, позволяющие

учитывать влияние одного или нескольких параметров на процессы, происходящие в системе, относятся к типу аналитических моделей. Однако эвристическая ценность этих моделей низка, их основная цель – описывать в компактной форме имеющийся эмпирический материал.

Подтипы моделей

В свою очередь, аналитические и имитационные модели подразделяются по ряду свойств на определенные подтипы. Например, оба типа моделей могут быть **статичными** и **динамическими**. В отличие от статичных моделей, динамические отображают временную динамику поведения объекта. Модели могут быть также точечными или распределенными. Так, например, численные значения переменных динамических точечных моделей имеют только временную динамику, переменные распределенных моделей варьируют и во времени и в пространстве.

Математические модели могут быть **детерминированными** или **стохастическими**. В детерминированных моделях значения рассчитываемых переменных при одних и тех же начальных условиях и входящих параметрах определяются однозначно (с точностью до ошибок вычисления), то есть при введении одних и тех же исходных данных каждый раз получается один и тот же результат. Стохастические модели дают для каждой переменной распределение возможных значений, характеризуемое такими вероятностными показателями, как математическое ожидание, среднее квадратичное отклонение и т.д., то есть при введении одних и тех же исходных данных каждый раз результаты модельных расчетов будут разными.

В ряде случаев применяются так называемые **феноменологические** математические модели, в которых отбрасываются детали механизмов изучаемых процессов. Обычно это диктуется задачами исследований только главных (базовых) признаков объектов.

При выборе подтипа модели определяющим критерием обычно служит круг решаемых задач. Так, например, хотя биологические процессы в той или иной степени всегда стохастичны, при решении определенных задач, например таких, как рассмотрение долгосрочной динамики объекта в усредненных условиях,

исчерпывающим средством могут служить детерминированные и базовые модели.

Для разработки надежных математических моделей требуются параметры, характеризующие вещественные, энергетические и информационные связи между компонентами моделируемой системы. Соответствующая количественная информация в достаточном объеме имеется лишь для ограниченного числа объектов. Для преодоления трудностей, возникающих в связи с неполнотой информации, при моделировании приходится прибегать к экстраполяции или использованию косвенных сведений, полученных при решении других задач. В этом случае уточнение параметров модели достигается методом последовательных приближений (итераций) результатов моделирования к имеющимся экспериментальным данным при многократном просчитывании модели на компьютере.

Ключевые моменты математического моделирования в естествознании

Следует выделить некоторые весьма важные моменты применения математического моделирования для описания биологических объектов.

Исходные предпосылки в построении моделей

Ключевым моментом при создании моделей являются исходные предпосылки, которые закладываются в их основу. Частым недостатком в моделировании является неполное или ошибочное обоснование принятых предпосылок.

Степень интегрированности и полнота отображения

При построении модели важно найти “золотую середину” в процессе отображения структуры изучаемого объекта. Слишком сложная структура модели делает невозможной ее реализацию, а избыточное упрощение структуры и слишком высокая интегрированность компонентов, минимизация может свести на нет ценность модели. Следует учесть, что один из основных аргументов прошлого в пользу минимизации моделей - трудность или невозможность решения слишком сложных систем дифференциальных уравнений, составляющих модель. В настоящее время этот аргумент отчасти утратил свою актуальность в связи с появлением быстросрабатывающих компьютеров нового поколения.

Достоверность моделей

Очень часто уравнения, включаемые в состав математических моделей биологических объектов, являются лишь формальным описанием экспериментальных кривых, отражающих функционирование этих объектов. Описание биологических процессов математическими формулами, включающими параметры, не имеющие физического или биологического толкования, не позволяет идентифицировать их величину в ходе лабораторных экспериментов. Это резко снижает достоверность модели. Поскольку биологические объекты, даже однотипные, не являются абсолютно идентичными, а также в связи с тем, что динамические исследования требуют много времени и усилий, нередко в качестве данных для проверки используется информация, на основании которой проводилась калибровка (подгонка параметров) моделей. Для проверки правильности отображения моделью изучаемых процессов необходимы независимые данные.

Практика моделирования

Сбор исходной информации

Ключевым моментом имитационного моделирования является сбор информации об объекте моделирования, исследуемых процессах и факторах, оказывающих влияние на их протекание.

Следует сразу отметить важный, особенно для начинающих исследователей, момент, связанный с тем, что помимо собственно результатов каких-либо опытов, полевых изысканий и т.п., первичным источником исходной информации служит научная литература. Литературный поиск, сравнимый к тому же по своей увлекательности с работой детектива, чрезвычайно облегчает сбор исходной информации, позволяя порой полностью избежать полевых и лабораторных исследований. В настоящее время этот процесс значительно облегчается наличием тематических электронных ресурсов в Интернете, возможностью применения программ-поисковиков, электронными картотеками и библиотеками.

Электронные картотеки научной литературы, сохраняя все функции бумажных картотек, представляют собой полноценные базы данных и позволяют хранить практически неограниченные объемы как текстовой, так и графической информации в очень компактном виде. Они обеспечивают быстрый доступ к инфор-

мации, ее поиск, легко модернизируются и копируются, не изнашиваются. Создание своей собственной электронной картотеки по тематике планируемых исследований может помочь сориентироваться в большом объеме исходной информации, выявить малоизученные аспекты и будет полезной при разработке программы научных работ. При работе в Microsoft Office электронные картотеки легко создаются с помощью мастера построения таблиц личного применения в системе управления базами данных Access.

Тип исходной информации диктует и методы ее накопления, оценки и предварительной обработки. Использование компьютерных технологий позволяет эффективно работать с исходными данными. Упорядоченная информация, представление которой поддается унификации, может накапливаться в базах данных, а для ее обработки могут применяться системы управления базами данных (СУБД). Для обработки немногочисленной или более разрозненной информации более рационально использовать электронные таблицы, позволяющие работать как с упорядоченной численной информацией, с которой можно проводить расчеты, так и с единичными данными или текстовыми или графическими материалами.

Наиболее предпочтительно использование исчерпывающей прямой информации об исследуемых объектах, однако такая ситуация возможна только в тех случаях, когда этапу собственно моделирования предшествует этап полевых и лабораторных исследований, специально ориентированных на сбор исходных данных для модели. В подавляющем большинстве случаев прямая информация является недостаточной. В такой ситуации прибегают к использованию косвенной информации. Например, при недостатке данных по круговороту какого-либо химического элемента или вещества, можно использовать данные по их химическим аналогам (так для Cs, Sr и их изотопов такими аналогами являются K и Ca).

Как известно, наиболее наглядным и компактным способом представления информации служат графики. Для построения графиков используется исходная цифровая информация, которая зачастую малодоступна или утрачивается с течением времени. Таким образом, данные сохраняются только в виде графиков. Существуют весьма полезные программы, осуществляющие про-

цесс обратный визуализации данных – оцифровку графических данных. Эти программные средства позволяют восстановить даже давно утраченные исходные данные. Графики сканируются, сохраняются в виде графических файлов, а затем обрабатываются программами–оцифровщиками. В качестве примера такой программы можно привести пакет Graph2Digit В. Плиско, который предназначен для оцифровки графиков, представленных файлами в форматах jpg, bmp или wmf. Программа позволяет оцифровать график с заданным шагом и при необходимости отредактировать полученные результаты. Результаты оцифровки можно сохранить в текстовый файл или скопировать в буфер обмена для дальнейшей обработки, например в Excel (рис. 2).

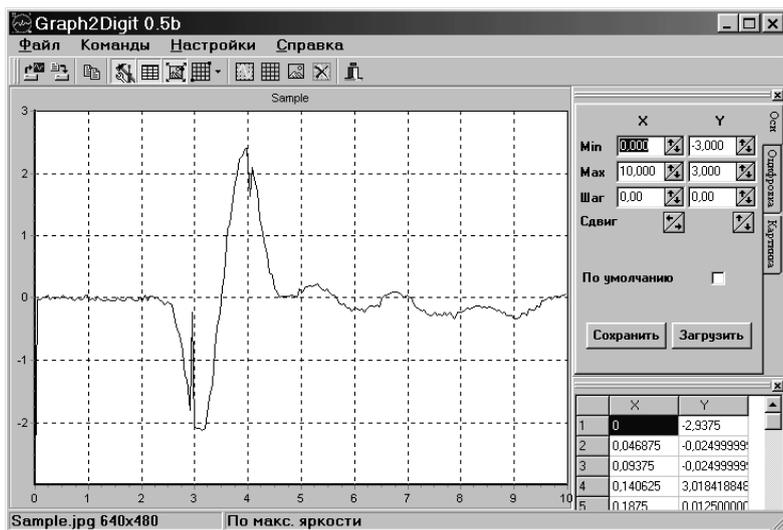


Рис. 2 Окно программы Graph2Digit с оцифрованным графиком

Схема построения математических моделей

Применение математического моделирования в естествознании характеризуется рядом этапов, которые в той или иной степени сопутствуют друг другу. В самом общем виде схему построения математических моделей можно представить следующим образом:

- определение задачи и сбор исходных данных;
- алгоритмизация;
- реализация и проверка модели;
- численные эксперименты на модели.

Более подробно этот процесс рассматривается у Федорова, Гильманова (1980) и включает в себя пункты, которые можно кратко описать следующим образом:

Постановка задачи - выделение конечного числа свойств и процессов, которые наиболее существенны для решения исследуемой проблемы.

Концептуализация – обобщение и анализ информации, имеющей отношение к исследуемому объекту, оценка полноты этой информации, создание концептуальной схемы объекта.

Спецификация – определение входных переменных и переменных состояния будущей модели.

Идентификация – определение математических соотношений между вышеуказанными переменными.

Наблюдения и эксперименты – сбор недостающей информации.

Реализация модели – построение разрешающего оператора модели в аналитическом виде или в виде компьютерной программы.

Проверка модели – сравнение результатов моделирования с уже имеющейся информацией, полученной в ходе предварительных исследований.

Исследование модели – изучение свойств модели, ее устойчивости к варьированию начальных условий, поведения в исследуемом диапазоне факторов влияния и т.д.

К этому мы можем добавить еще один этап – **проведение с помощью модели численных экспериментов по изучению и**

прогнозированию поведения реальной системы - объекта моделирования в интересующих исследователя ситуациях.

Несколько важных замечаний, которые прямо относятся к практике моделирования.

При построении моделей удобно применять язык потоковых диаграмм Форрестера. Пример такой диаграммы представлен на рис. 3. Переменные состояния отображаются в виде поименованных прямоугольников. Перенос вещества или энергии – сплошными стрелками, а информационные связи – пунктирными. Вентили соответствуют функциям переноса. Внешние переменные обозначаются эллипсами. Внешние по отношению к системе резервуары – бесформенными замкнутыми фигурами. Вспомогательные переменные (на рисунке не представлены) – кругами.

Также говоря о концептуализации, следует упомянуть о концептуально-балансовых моделях, отражающих в компактной и наглядной форме имеющуюся качественную и количественную информацию о функционировании объекта исследования и очень полезных при построении потоковых диаграмм и проведении проверки работы модели по интегрированным показателям (Рис. 4).

Еще одно важное замечание относительно функций переноса. При подборе математических уравнений, отражающих зависимости, которые предполагается использовать для написания функций переноса, следует учитывать, что существуют 3 возможных способа записи уравнений: уравнения для величин, приведенные уравнения для величин и уравнения для численных значений. Для экологического имитационного моделирования ценность имеют уравнения, написанные двумя первыми способами. В уравнениях для величин каждое обозначение представляет символ физической величины и может принимать различные значения, равные произведению численного значения на единицу измерения. Поэтому данные уравнения не зависят от выбранной системы единиц измерения и принципиально справедливы.

В ряде случаев в литературе можно столкнуться с употреблением так называемых приведенных уравнений. Это бывает в тех случаях, когда часто пользуются одним и тем же уравнением, содержащим некие константы. Авторы иногда находят целесообразным, выбрав соответствующие единицы, заранее подсчитать

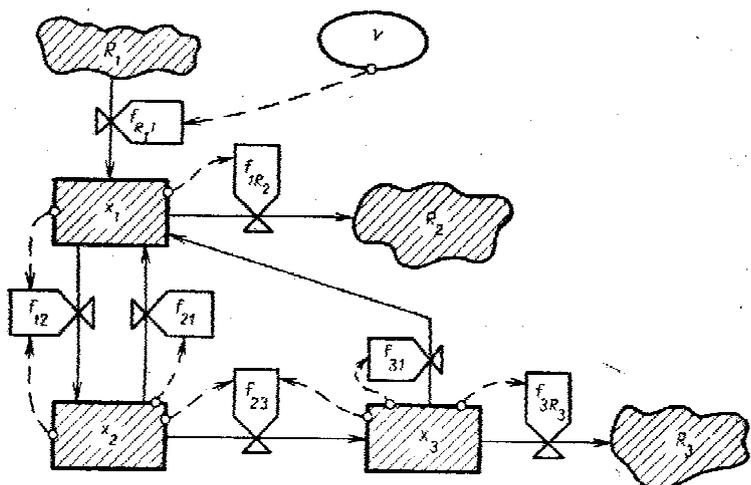


Рис. 3 Поточковая диаграмма движения азота в экосистеме (Гильманов, 1978)

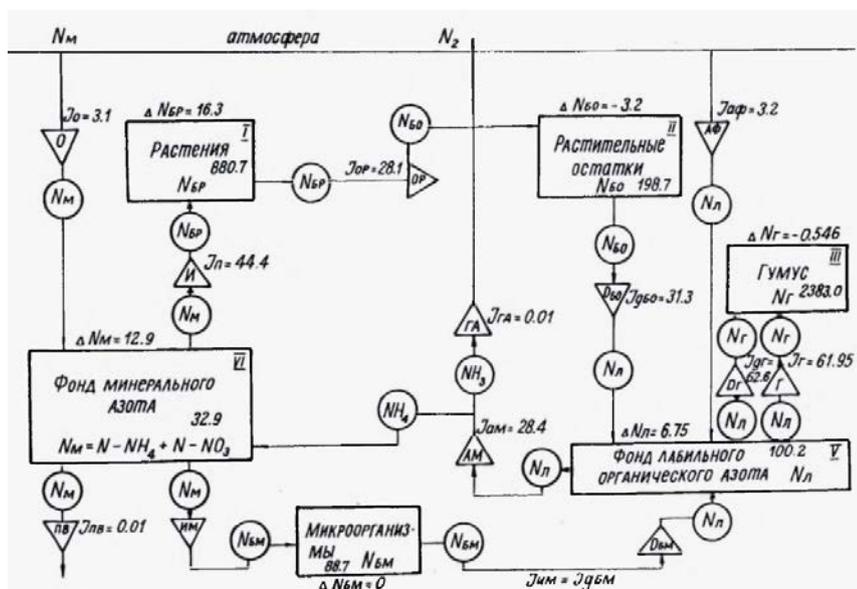


Рис. 4. Концептуально-балансовая модель круговорота азота в 165-летнем сосняке черничном среднетаежной подзоны ($\Delta N, J$ — кг/га в год, N — кг/га) (Федорец, Бахмет, 2003)

повторяющиеся численные значения. Как правило, в этом случае единицы измерения указываются после формулы.

Подобный подход в экологии используется часто, даже при проведении достаточно несложных расчетов. Так, например, в радиоэкологии широко употребляется коэффициент перехода радионуклидов из почвы в растения, который вычисляется по формуле:

$$КП = \frac{\text{удельная активность растительного образца (ед. активности / ед. массы)}}{\text{плотность загрязнения почвы (ед. активности/ед. площади или массы)}} .$$

При сокращении единиц активности получаем невнятную размерность (ед. площади или массы)/ ед. массы, которая при отсутствии дополнительных пояснений позволяет по-разному интерпретировать смысл данного параметра. Такой подход требует особого внимания исследователя при подборе исходной информации для модели.

И последнее замечание. Важным этапом в моделировании является оценка адекватности описания моделью поведения объекта. Проверка результатов работы модели должна быть проведена по независимым данным, использование данных по которым проводилась идентификация параметров модели недопустимо. Путем сопоставления поведения расчетных и экспериментальных данных делается вывод об адекватности модели. Осуществляется это различными способами. Для качественного сравнения можно использовать наглядное графическое представление.

При наличии двух параллельных рядов данных может быть проведена более строгая проверка, например, с использованием коэффициента детерминации, коэффициента несовпадения Тейла или критерия Нэша – Сатклиффа. При недостатке экспериментальных данных для проверки иногда можно восполнить их, прибегнув к аппроксимации или интерполяции.

Для иллюстрации вышесказанного рассмотрим порядок построения простейшей модели на примере исследования гипотетической ситуации техногенного загрязнения растительности и почвы при одноразовом поступлении загрязнителя из атмосферы.

Постановка задачи: Изучить закономерности поведения загрязнителя в системе почва – растения и его выведение из изучаемой системы.

Концептуализация: Имеется система из двух компонентов – почвы и растительности. Эти компоненты связаны между собой противоположно направленными потоками. Загрязнитель поступает из атмосферы как в почву, так и на растительность, и выводится из почвы в подстилающие породы. Предполагается, что внешних факторов, влияющих на эти процессы, нет. Концептуальная схема функционирования объекта отображается в виде так называемой потоковой диаграммы (рис. 5). Интересующие нас величины, отражающие количественные аспекты функционирования объекта (в нашем случае – это количество загрязнителя в растительности или почве), называются переменными состояния. Переменные состояния на потоковых диаграммах обозначены прямоугольниками, потоки (функции переноса) – сплошными стрелками, внешняя переменная – эллипсом.

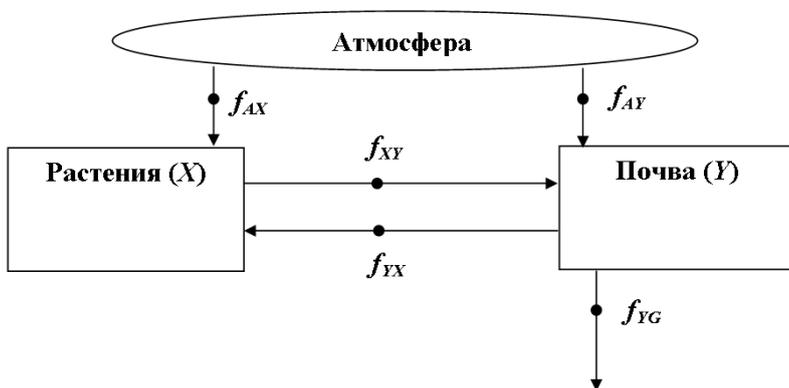


Рис. 5 Потоковая диаграмма динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения

Спецификация: В состав модели включены две переменных состояния – содержание загрязнителя в растениях (X) и в почве (Y). Размерность переменных – грамм на квадратный метр ($г/м^2$).

Шаг, с которым будет рассматриваться динамика содержания загрязнителя – 1 год.

Идентификация: Модель представляет собой систему из двух конечно-разностных уравнений:

$$\Delta X = f_{AX} + f_{YX} - f_{XY}$$

$$\Delta Y = f_{AY} + f_{XY} - f_{YG}$$

В левых частях уравнений – изменение величины соответствующей переменной состояния за 1 год, в правых – сумма потоков (функций переноса), обуславливающих это изменение ($\text{г/м}^2/\text{год}$).

В данном примере присутствуют следующие функции переноса:

f_{AX} и f_{AY} – поступление загрязнителя из атмосферы на растительность и в почву

f_{XY} – переход загрязнителя из растительности в почву (с опадом, в процессе вымывания осадками и т.д.)

f_{YX} – корневое поглощение загрязнителя растениями из почвы

f_{YG} – выход загрязнителя за пределы почвенного профиля (лессиваж, диффузия, конвективный перенос и т.д.)

Каждая функция переноса представляет собой уравнение той или иной формы, отражающее интенсивность отдельно рассматриваемого процесса. Например, если предположить, что за год из растительности в почву переходит постоянная доля загрязнителя, содержащегося в растительности, то функция f_{XY} выглядит следующим образом:

$f_{XY} = a_1 \cdot X$, где a_1 – константа, показывающая какая доля загрязнения растительного покрова поступает в почву за год. В простейшем случае все функции переноса могут быть представлены в виде линейных функций.

Наша модель построена на бумаге, теперь остается реализовать ее в виде компьютерной программы, проверить по экспериментальным данным и исследовать ее поведение при изменении начальных условий. На рис. 6 представлен вариант реализации данной модели в системе программирования QuickBasic.

'Prog1

CLS 'Clean screen (очистить экран)

n = 10 'prognosis (прогноз)

x = 0 'plants (растения)

y = 0 'soil (почва)

'Parameters (параметры)

a1 = .5 : a2 = .05: a3 = .01 : a4 = 100 : a5 = 200 :

FOR k = 1 TO n 'year cycle (цикл по годам)

'Transfer functions (функции переноса)

fax = 0 : fay = 0 : fyx = a2 * y

fxu = a1 * x : fyu = a3 * y

IF k = 1 THEN

fax = a4

fay = a5

END IF

'State variables (переменные состояния)

x = x + fax + fyx - fxy

y = y + fay + fxy - fyx - fyu

PRINT x, y ' выдача результатов на экран

NEXT k

END

Рис. 6 Текст программы на Basic двухкомпонентной модели динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения для сценария одноразового выпадения

Реализация имитационных моделей

Имитационные модели обычно реализуются на компьютере в виде программ. Развитие вычислительных средств создало предпосылки к прямому участию ученых-естествоиспытателей как в создании, так и в реализации моделей. Удобный интерфейс и большие возможности различных сред для структурного и объектно-ориентированного программирования сделали более привлекательным применение имитационного моделирования для ученых, не являющихся профессиональными программистами. Для того чтобы облегчить процесс создания моделей, были разработаны языки моделирования (например, DINAMO, CSSL). Эти языки представляют собой расширения универсальных языков программирования с помощью операторов, технические детали, работы которых программисту знать необязательно.

Существуют специализированные компьютерные системы, предназначенные для создания имитационных моделей различных объектов. Примером такого программного продукта может служить пакет GPSS World, разработанный компанией Minuteman Software (США). Общецелевая система имитационного моделирования GPSS World – это мощная среда компьютерного моделирования общего назначения, разработанная для профессионалов в области моделирования. Необходимо, однако, отметить, что широкие возможности этой системы отягощены необходимостью изучения достаточно сложного внутреннего языка. Здесь же следует упомянуть такие универсальные математические системы, как MathCad, MatLab и др., ориентированные на проведение научно-технических расчетов. Они представляют собой интерактивную среду для программирования, численных расчетов и визуализации результатов. С их помощью можно анализировать данные, разрабатывать алгоритмы и создавать модели. Но это опять-таки связано с необходимостью изучать достаточно сложный высокоуровневый встроенный язык.

В то же время существуют программы, которые позволяют создавать имитационные модели, не вникая в детали программирования. В качестве примера можно привести программу SCoP (Simulation Control Program), предназначенную для моделирования биологических систем. Составителям моделей в диалоговом режиме предлагается описать систему алгебраическими и диффе-

ренциальными уравнениями и указать последовательность вызова подпрограмм. Затем созданный текст программы компилируется, компонуется с библиотекой SCoP и запускается на счет.

Более наглядный, на наш взгляд, способ реализации моделей предоставляет пакет SB ModelMaker. Пользователю предлагается создать потоковую диаграмму прямо на экране монитора (кнопки меню “Compart” и ”Flow”), как это показано на рис. 7, где представлена модель из двух компонентов C1 и C2, связанных одним потоком F1. Затем необходимо указать для каждого потока уравнение, описывающее этот поток (курсор устанавливается на стрелку потока, при нажатии кнопки мыши открывается окно “Flow Defenition”). Далее вводятся численные значения параметров, входящих в эти уравнения (кнопка меню “Param”). Теперь остается только выбрать способ выдачи результата счета (цифровой (кнопка меню “Table”) и (или) графический (кнопка меню “Graph”)) и запустить модель на счет (кнопка меню команда “Run”). Отметим, что данный пакет, как и другие ему подобные, позволяет строить только простые модели и ориентирован на тех исследователей, которые эпизодически занимаются созданием несложных имитационных моделей обобщающего или демонстрационного характера.

В целом, использование таких пакетов для создания сложных, многокомпонентных моделей, по нашему мнению, неэффективно, поскольку потребует от пользователя таких усилий по освоению данных программ, которые сопоставимы с обучением программированию на алгоритмическом языке. Возможности же любой из этих программ, как правило, ограничены, скорость расчетов низкая, совместимость с другими программными средствами отсутствует, т.е. построенные с их помощью модели не могут интегрироваться в более крупные модельные комплексы. Применение таких систем может быть оправдано только в случае наработки достаточного числа специализированных модулей, которые были бы пригодны для использования в конкретных имитационных моделях.

Некоторые исследователи, достаточно хорошо освоившие какие-либо электронные таблицы (чаще всего это Excel) и умеющие писать макросы или даже программировать на встроенном языке, используют эти таблицы для создания моделей.

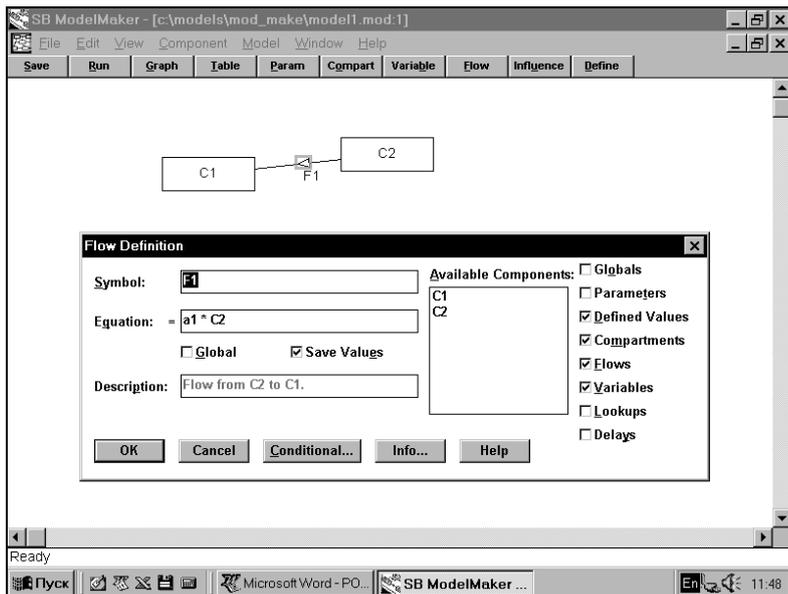


Рис. 7 Определение функции переноса в пакете имитационного моделирования ModelMaker

При построении простых моделей это может быть наиболее оптимальным вариантом. Электронные таблицы Excel всегда под рукой – это неотъемлемый компонент широко распространенного пакета Microsoft Office. Процесс реализации модели в электронных таблицах очень прост и легко контролируется, он базируется на правилах табличного программирования. Это подразумевает, что значения переменных модели для каждого шага (например, по времени) вычислялись явным образом, со ссылкой на элементы таблицы (одну или несколько ячеек).

С помощью Excel можно очень просто организовать в наглядном виде выдачу результатов в виде графика или диаграммы.

В качестве примера рассмотрим реализацию в электронных таблицах Excel простейшей двухкомпонентной модели (Рис. 8, 9).

Недостатки при реализации моделей в электронных таблицах те же, о которых говорилось выше, а быстродействие таких моделей очень низкое.

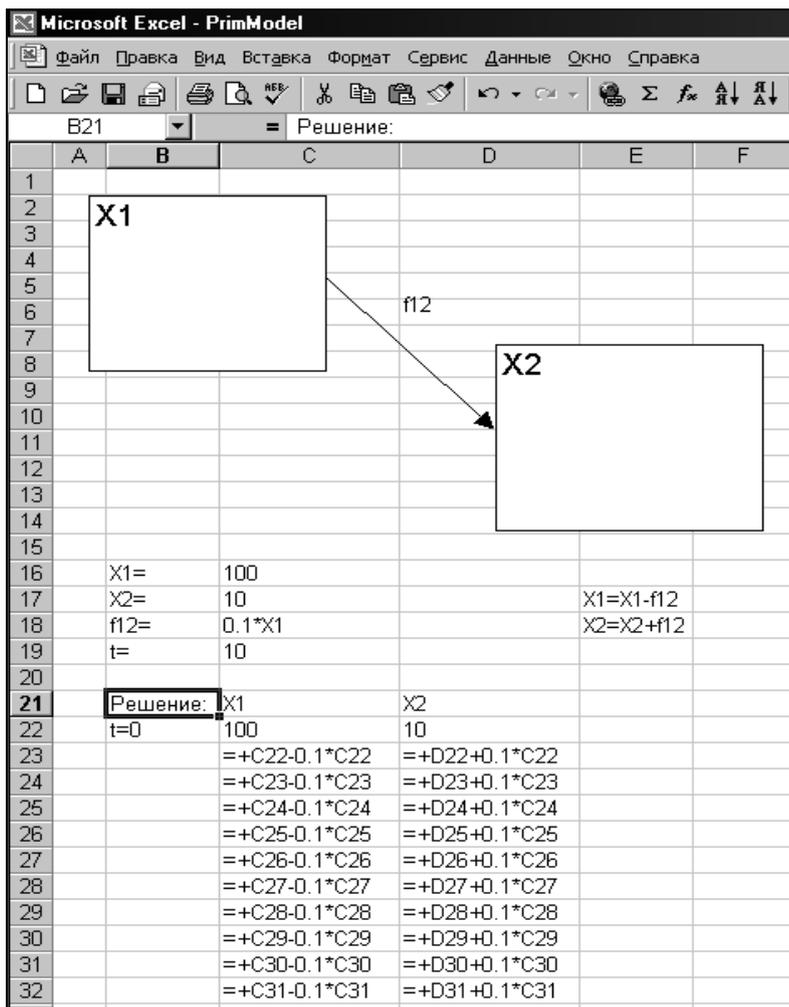


Рис. 8 В ячейках таблицы, в которых производятся расчеты, приведены расчетные формулы

Microsoft Excel - PrimModel

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Данные Окно Справка

B21 = Решение:

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2		X1					
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							
16		X1=		100			
17		X2=		10		X1=X1-f12	
18		f12=	0.1*X1			X2=X2+f12	
19		t=		10			
20							
21		Решение:	X1	X2			
22		t=0		100		10	
23				90		20	
24				81		29	
25				72.9		37.1	
26				65.61		44.39	
27				59.049		50.951	
28				53.1441		56.8559	
29				47.82969		62.17031	
30				43.046721		66.953279	
31				38.7420489		71.2579511	
32				34.86784401		75.13215599	

Рис. 9 В ячейках таблицы, в которых производятся расчеты, представлены их результаты

Более традиционным способом реализации моделей является создание программ на различных алгоритмических языках. Для этого существует большой выбор программных пакетов, в том числе и для персональных компьютеров, например таких, как QuickBasic, C++, Visual Basic или подобные им. Эти системы программирования включают как минимум экранный текстовый редактор программ, управляющую среду с многооконными меню, отладчик, обучающую систему и встроенный компилятор, что создает все необходимые условия для реализации моделей практически любой сложности.

Для начинающих рекомендуем систему программирования QuickBasic 4.5 фирмы Microsoft. Это объясняется тем, что алгоритмический язык BASIC является одним из самых простых и доступных для широкого круга пользователей персональных компьютеров и в тоже время развитым структурным и процедурным языком программирования достаточно высокого уровня для того, чтобы заинтересовать любого пользователя, тем более занимающегося имитационным моделированием, для которого необходима, в первую очередь возможность проводить математические расчеты и без проволочек вносить изменения в программу и получать результаты расчетов. Входящая в комплект QuickBASIC 4.5 обучающая программа позволяет быстро освоить систему и перейти к созданию программ. Интегрированная среда QuickBASIC 4.5 включает хороший и простой редактор, встроенную контекстную помощь, отладчик, средства создания исполняемых программ и стандартных библиотек — все это является удобным инструментом для быстрой реализации имитационных моделей. Результаты расчетов для дальнейшей с ними работы можно сразу выводить в текстовый файл с расширением .dat, который впоследствии загружается в те же офисные приложения Word или Excel для дальнейшей обработки. Второй вариант - выводить их для предварительного просмотра на экран, затем сохранять содержимое экрана в буфере в виде графической копии всего экрана (Print Screen) или копии отдельного окна (Alt + Print Screen). Это достаточно удобно, если результаты расчетов помещаются на один экран. Затем из буфера информацию можно со-

хранить в виде рисунка, например в Paint Brush, или вставить в документ какого-либо офисного приложения (например, Word или Power Point).

Также для работы Windows XP и выше, LINUX или MAC OS в Интернете по адресу <http://www.qb64.net> доступен для скачивания бесплатный кроссплатформенный эмулятор – компилятор с англоязычным интерфейсом QB64, полностью совместимый с QuickBasic 4.5. QB64 создает исполняемые файлы, которые могут быть выполнены при использовании Windows (кроме 9X), LINUX или MAC OSX.

Результатом дальнейшего развития систем программирования, основанных на Бейсике, является Visual BASIC, частично совместимый с QuickBASIC и предназначенный для создания программ, работающих в среде Windows. Это более ресурсоемкая среда программирования. Важным является организация удобного интерфейса работы пользователя с моделью. Visual BASIC представляет практически неограниченные возможности по организации удобного интерфейса, в нашем случае – диалога с моделью, просмотра и сохранения результатов расчетов (Рис. 10). Модельные расчеты на компьютерах с современными процессорами выполняются в нем быстрее, чем в QuickBASIC, но они требуют гораздо больших усилий от начинающего программиста для организации ввода и вывода информации. Освоение Visual BASIC или какого-либо другого объектно-ориентированного языка может быть следующим этапом по мере развития навыков программирования.

Представление полученных результатов моделирования может быть реализовано в текстово-цифровом виде и (или) в графическом. Первый способ предпочтителен для рабочих вариантов моделей, конечные и демонстрационные версии для большей наглядности должны включать графики.



Динамика содержания Sr-90 в компонентах древостоя с шагом в 1 день

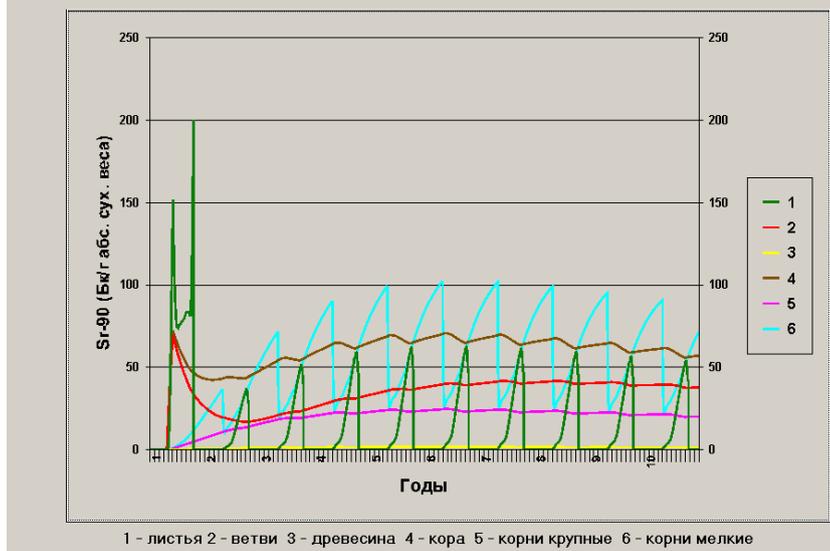


Рис. 10 Пример интерфейса модели, реализованной в Visual BASIC, и выдачи программой результатов расчета

Вопросы для самоконтроля

1. Назовите основные типы математических моделей.
2. В чём различие между аналитическими и имитационными моделями?
3. В чём заключается основа имитационного моделирования?
4. В каком случае применяется имитационное моделирование?
5. Какие пункты включает в себя построение имитационной модели?
6. Что такое потоковая диаграмма? Как обозначаются на ней переменные и потоки?
7. Что такое функция переноса и параметр уравнения?
8. Что находится в правой и левой частях конечно-разностного уравнения?
9. Назовите основные средства реализации имитационных моделей.
10. Какие свойства экосистем создают предпосылки к применению именно имитационного моделирования?
11. Что такое концептуально-балансовая модель ?
12. Какие процессы воспроизводят радиобиологические комбинированные модели ?

Практические задания к спецкурсам «Экологическая информатика» и «Математическое моделирование в радиобиологии и радиоэкологии»

Работы 1 - 4 (раздел Миграционные модели) предназначены для бакалавров. Цель – освоение основ методологии имитационного моделирования в экологии по предложенным схемам поведения техногенных загрязнителей в окружающей среде.

Работы 5 - 10 (раздел Комбинированные модели) предназначены для магистров. Цель – освоение самостоятельного подхода к моделированию разнообразных радиоэкологических ситуаций, связанных с миграцией радионуклидов и оценкой дозовых нагрузок в динамических условиях радиоактивного загрязнения.

Миграционные модели

Практические задания этого раздела рассчитаны на выполнение учащимися работы по построению моделей по предложенному сценарию. Модели предлагается реализовывать в электронных таблицах Microsoft Excel.

Построение моделей включает в себя следующие задачи:

- создание структуры имитационной модели;
- составление уравнений, описывающих динамику переменных состояния;
- численный эксперимент с моделью по прогнозированию динамики содержания загрязнителя в компонентах моделируемой системы.

В отчете должны быть представлены:

- потоковая диаграмма;

- описание уравнений и входящих в них функций переноса и параметров;
- численное и графическое представление результатов работы модели.

Также к отчету должна быть приложена электронная таблица или программа на алгоритмическом языке, в виде которой реализована разработанная модель.

Отчеты подаются в виде файла Excel.

Работа 1. Предлагается построить имитационную модель миграции экотоксиканта в системе почва - растения, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 11.

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 0.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид:

$$f = a_i * X_i \quad \text{или} \quad f = a_i * Y_i$$

- Прогноз производится на 20 лет с шагом 1 год
- Загрязнение происходит в первый год (на поверхность почвы выпадает 500 условных единиц загрязнителя, на растения – 300)
- Все параметры a_i равны 0,01

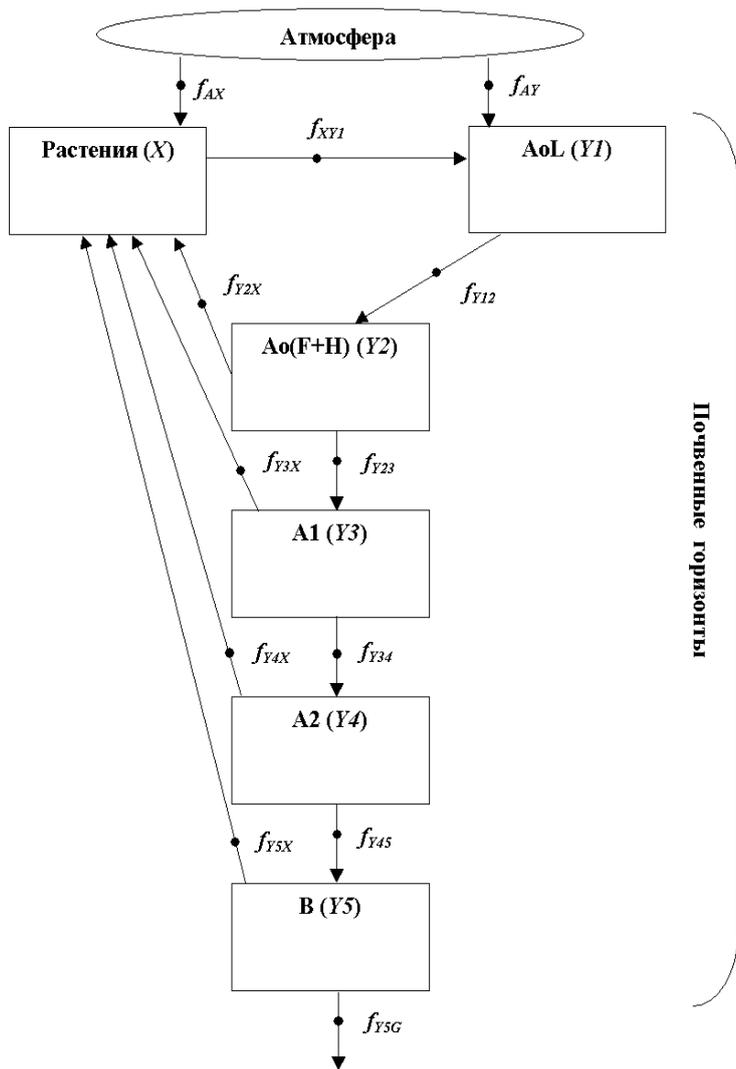


Рис. 11. Поточковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (для дерново-подзолистой почвы, поступление в почву из корней не учитывается)

Работа 2. Предлагается построить имитационную модель миграции техногенного загрязнителя в системе растения – почва, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на рис. 12.

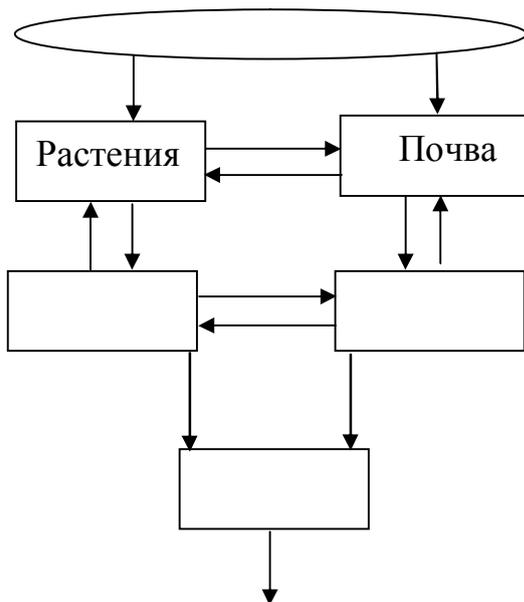


Рис. 12. Потоковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (обучающиеся должны сами присвоить имена переменным и функциям переноса)

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 5.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид : $f = a_i * X$ или $f = a_i * Y_i$;
- Прогноз производится на 25 лет с шагом 1 год;
- Загрязнение происходит в первый и десятый годы (в эти годы выпадает 300 условных единиц);
- Все параметры a_i равны 0,015.

Работа 3. Предлагается построить имитационную модель миграции техногенного загрязнителя в системе почва – растения – животные, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 13.

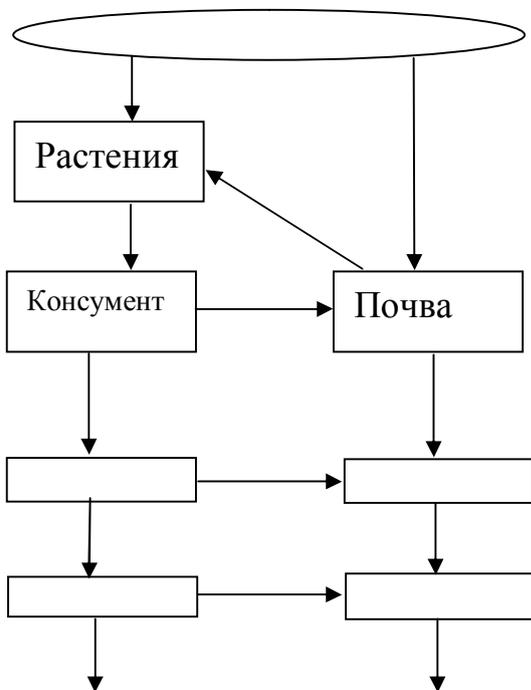


Рис. 13. Потоковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (обучающиеся должны сами присвоить имена переменным и функциям переноса)

Принято:

– Начальные значения всех переменных состояния равны 10.

– Функции переноса линейные, имеют следующий вид :

$$f = a_i * X_i \text{ или } f = a_i * Y_i$$

– Прогноз производится на 15 лет с шагом 1 год

– Загрязнение происходит в первый и пятый годы (на почву в эти годы выпадает 200 условных единиц, на растения – 10)

– Все параметры a_i равны 0,02

Работа 4. Предлагается построить имитационную модель миграции техногенного загрязнителя в системе растения – почва, основываясь на потоковой диаграмме, представленной на Рис. 14.

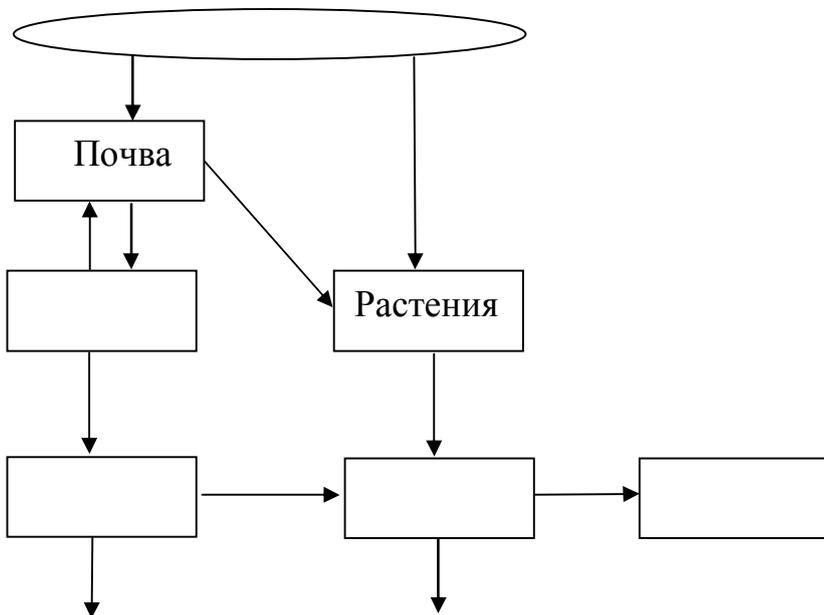


Рис. 14 Потоковая диаграмма многолетней динамики содержания загрязнителя в системе почва – растения (обучающиеся должны сами присвоить имена переменным и функциям переноса)

Принято:

- Начальные значения всех переменных состояния равны 20.
- Функции переноса линейные, имеют следующий вид :

$$f = a_i * X_i \text{ или } f = a_i * Y_i$$
- Прогноз производится на 10 лет с шагом 1 год
- Загрязнение происходит в первый и третий годы (на почву в эти годы выпадает 1000 условных единиц, на растения – 10)
- Все параметры a_i равны 0,03

Комбинированные модели

Практические задания в этом разделе рассчитаны на самостоятельную работу учащихся по построению моделей. Модели должны включать в себя не меньше 5-ти переменных состояния. Кроме перечисленных ниже сценариев возможно выполнение задания по сценарию, предложенному самим студентом, если он будет удовлетворять по своей сложности сути практикума.

Модели предлагается реализовывать в электронных таблицах Microsoft Excel или в среде программирования QB64 (с учетом умений обучающихся и наличия необходимых программных средств).

Построение моделей включает в себя следующие задачи:

- поиск фактических данных по поступлению и перераспределению радионуклидов между компонентами рассматриваемого объекта;
- создание структуры имитационной модели;
- составление уравнений, описывающих динамику переменных состояния;
- расчет дозы внешнего и внутреннего облучения рассматриваемых представителей биоты.

В отчете должны быть представлены:

- описание объекта моделирования;
- список переменных состояния;
- потоковая диаграмма;
- описание уравнений и входящих в них функций переноса и параметров;
- численное и графическое представление результатов работы модели;
- список источников, из которых взята исходная информация об объекте, уравнения расчета доз и величины параметров.

Также к отчету должна быть приложена электронная таблица или программа на алгоритмическом языке, в виде которой реализована разработанная модель.

Отчеты подаются в виде файла Word.

Работа 5. Построить модель миграции радионуклида по пищевой цепочке степной экосистемы и оценить внешнюю и внутреннюю дозовые нагрузки на травоядных и хищных животных.

Работа 6. Построить модель миграции радионуклида в организме коровы и оценить внешнюю и внутреннюю дозовые нагрузки на животное.

Работа 7. Построить модель миграции радионуклида в экосистеме стоячего водоема и оценить внешнюю дозовую нагрузку на основных гидробионтов.

Работа 8. Построить модель миграции радионуклида в системе АЭС Фукусима – суша – океан и оценить внешнюю дозовую нагрузку на прибрежных морских гидробионтов различных экологических групп.

Работа 9. Построить модель миграции радиоцезия в цепи почва – растения - травоядное животное – человек и оценить дозовую нагрузку на человека при употреблении в пищу мяса 3 раза в неделю по 0,5 кг (свежая масса).

Работа 10. Построить модель гемопозеза в организме, подверженном хроническому облучению

В отчете должны быть представлены:

- описание объекта моделирования;
- список переменных состояния;
- потоковая диаграмма;
- описание уравнений и входящих в них функций переноса и параметров;
- численное и графическое представление результатов работы модели;
- список источников, из которых взята исходная информация об объекте, уравнения расчета доз и величины параметров.

Также к отчету должна быть приложена электронная таблица или программа на алгоритмическом языке, в виде которой реализована разработанная модель.

Отчеты подаются в виде файла Word, и делается доклад по результатам работы с презентацией.

Примеры структуры комбинированных моделей, построенных учащимися

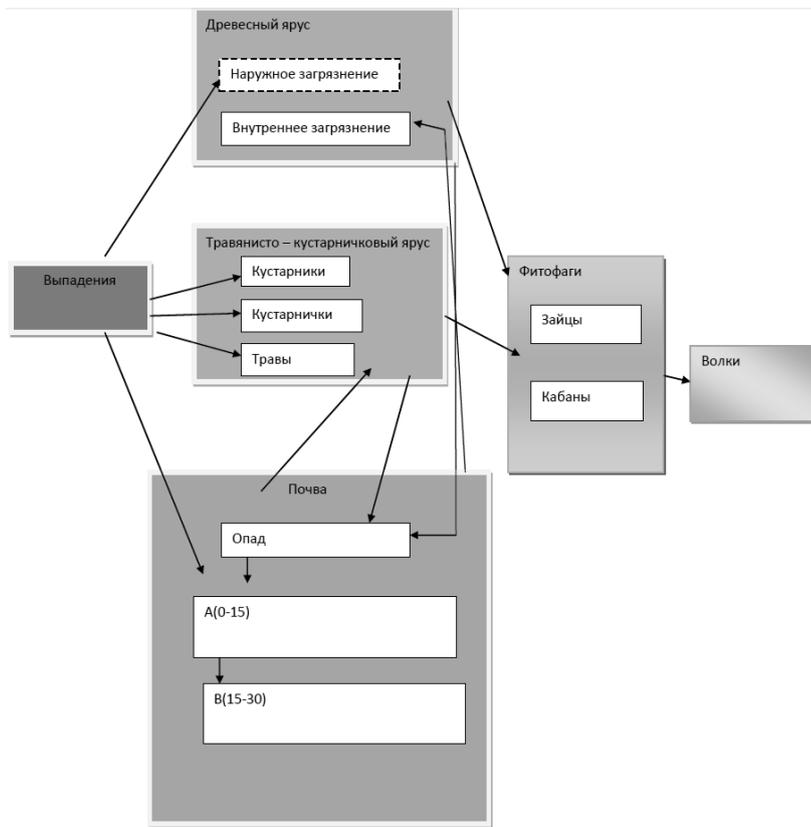


Рис. 15 Схема модели поведения радиоцезия и оценки дозовой нагрузки на биоту в экосистеме широколиственного леса

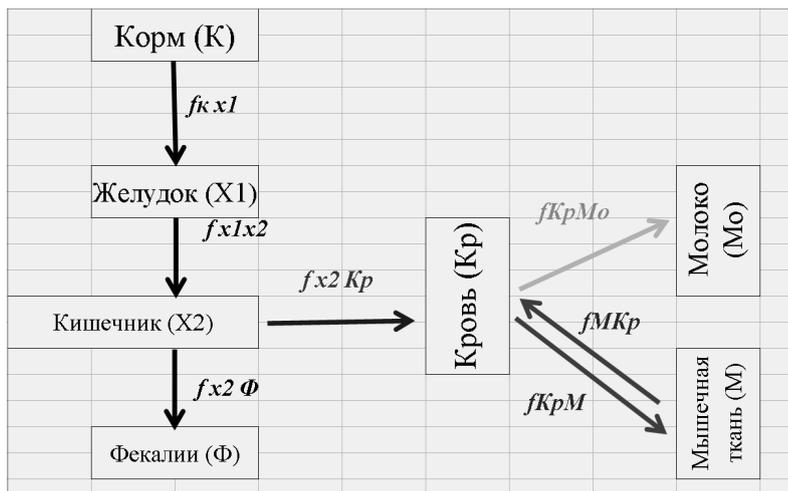


Рис 16. Схема модели распределения радионуклида в организме коровы

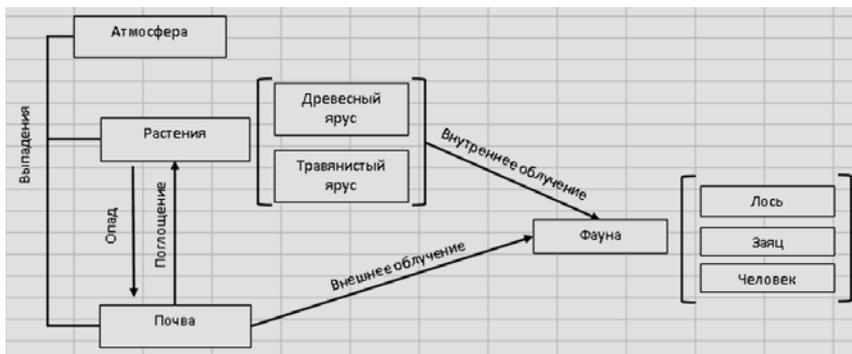


Рис. 17 Схема модели поведения радиоцезия и оценки дозовой нагрузки на биоту в экосистеме леса

Формулы расчета дозовых нагрузок

(по Спиридонов, Мукушева, 2010)

Мощность внешней эффективной дозы (мкЗв/сут):

$$P_i^{ext}(t) = P(t) \cdot k_p \cdot k_c \cdot R_i(t),$$

где $P(t)$ - мощность поглощенной дозы в воздухе на высоте 1 м над открытым участком почвы (мкГр/сут); k_p - коэффициент перехода от поглощенной дозы в воздухе к эффективной дозе (0.75 мкЗв/мкГр); k_c - коэффициент влияния снежного покрова на величину эффективной дозы; $R_i(t)$ - фактор уменьшения дозы, зависящий от типа жилого здания и профессии человека (если облучаемый объект – человек).

Мощность поглощенной дозы в воздухе:

$$P(t) = \sigma \cdot r(t) \cdot d_s \cdot \exp(-\lambda \cdot t),$$

где σ – плотность загрязнения почвы радионуклидами (кБк/м²); d_s - мощность дозы в воздухе от плоского тонкого источника, расположенного на границе раздела воздух – почва; $r(t)$ – функция, описывающая влияние миграции радионуклидов в почве, λ – константа радиоактивного распада.
 d_s для ¹³⁷Cs равен 0.061 мкГр/сут)/(кБк/м²).

Доза внутреннего облучения, сформированная за период времени от t_1 до t_2 в результате употребления загрязненной радионуклидом пищи:

$$D_{int}(t_1, t_2) = dk_i \int_{t_1}^{t_2} \sum_k C_k(t) \cdot V_k dt,$$

где dk_i – дозовый коэффициент (мЗв/Бк), $C_k(t)$ – концентрация радионуклида в k -ом пищевом продукте (Бк/кг(л)); V_k – суточное потребление k -го пищевого продукта (кг/сут).

dk_i для ¹³⁷Cs равен $1.4 \cdot 10^{-8}$ Зв/Бк.

Радиобиологические модели

Моделирование нарушений системы гемопоэза при лучевом поражении (модель Смирновой О.А., 1992)

$$dX_1/dt = BX_1 - \gamma X_1 - D'X_1/D_1$$

$$dX_2/dt = \gamma X_1 - FX_2 - D'X_2/D_2$$

$$dX_3/dt = FX_2 - EX_3 - D'X_3/D_3$$

$$dX_4/dt = EX_3 - AX_4 - D'X_4/D_4$$

$$dX_{mi}/dt = D'X_i/D_i/(1+\rho_i) - \mu X_{mi}, (i = 1, \dots, n)$$

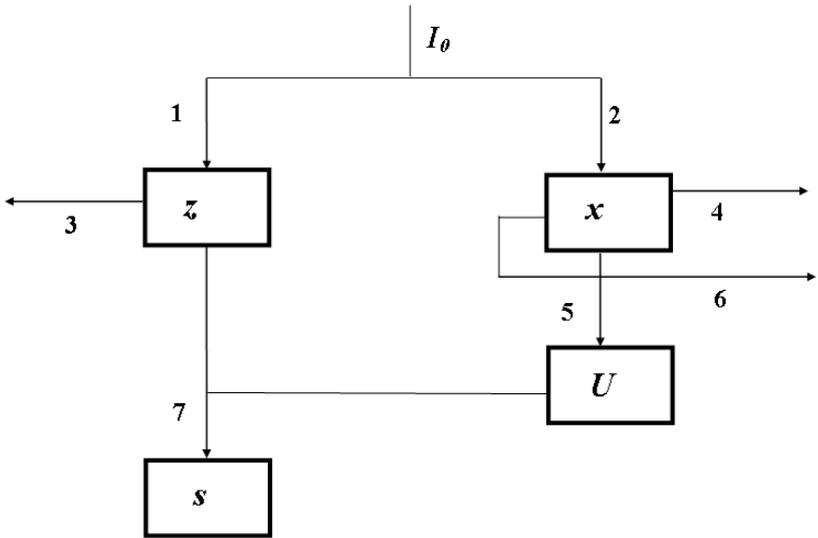
$$dX_{tmi}/dt = \rho_i D'X_i/D_i/(1+\rho_i) - \nu X_{tmi}, (i = 1, \dots, n)$$

$$dI/dt = G \sum_{i=1}^m \theta_i(X_i + \Phi X_{mi} + \Gamma X_{tmi}) - HI$$

В качестве переменных модели использованы концентрации ниже перечисленных клеток, а также концентрация специфического кейлона (I).

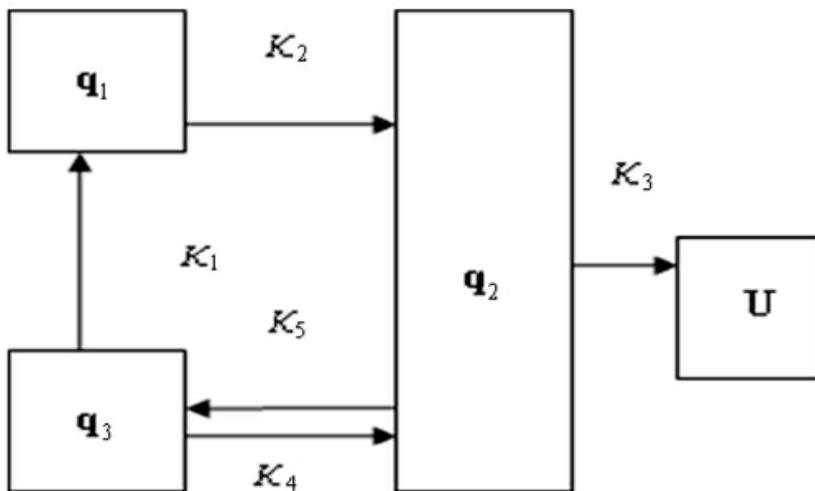
- костномозговые клетки-предшественники - от стволовой, находящейся в соответствующем микроокружении, до стадии морфологически идентифицируемой делящейся включительно (X_1);
- неделящиеся - созревающие клетки костного мозга (X_2);
- зрелые клетки крови (X_3).
- гранулоциты тканей (X_4).
- Радиочувствительные клетки по реакции на облучение разделены на три группы:
- неповрежденные клетки (X_i),
- поврежденные клетки, погибающие через 1-2 суток (X_{pi}),
- тяжелоповреждённые клетки, погибающие в течение 4-7 часов после акта взаимодействия с ионизирующим излучением (X_{tpi}).

**Модель быстрой кинетики постлучевых изменений
(Чернавский Д. С. и др., 1975)**



- z - радиационные повреждения,
- x - некий активный фактор, возникающий под действием радиации (например, промежуточные продукты распада, дефекты мембран и т.д.),
- U - интенсивность метаболизма,
- s - доля выживших клеток,
- I_0 - мощность источника радиации,
- 1 – скорость возникновения повреждений,
- 2 – скорость возникновения активного фактора,
- 3 – репарации,
- 4 – отток (уменьшение),
- 5 – влияние x на метаболизм,
- 6 – снижение влияния при больших x ,
- 7 – влияние количества повреждений на s .

Модель метаболизма радиоактивного йода
(Власова О.П. , 2010)



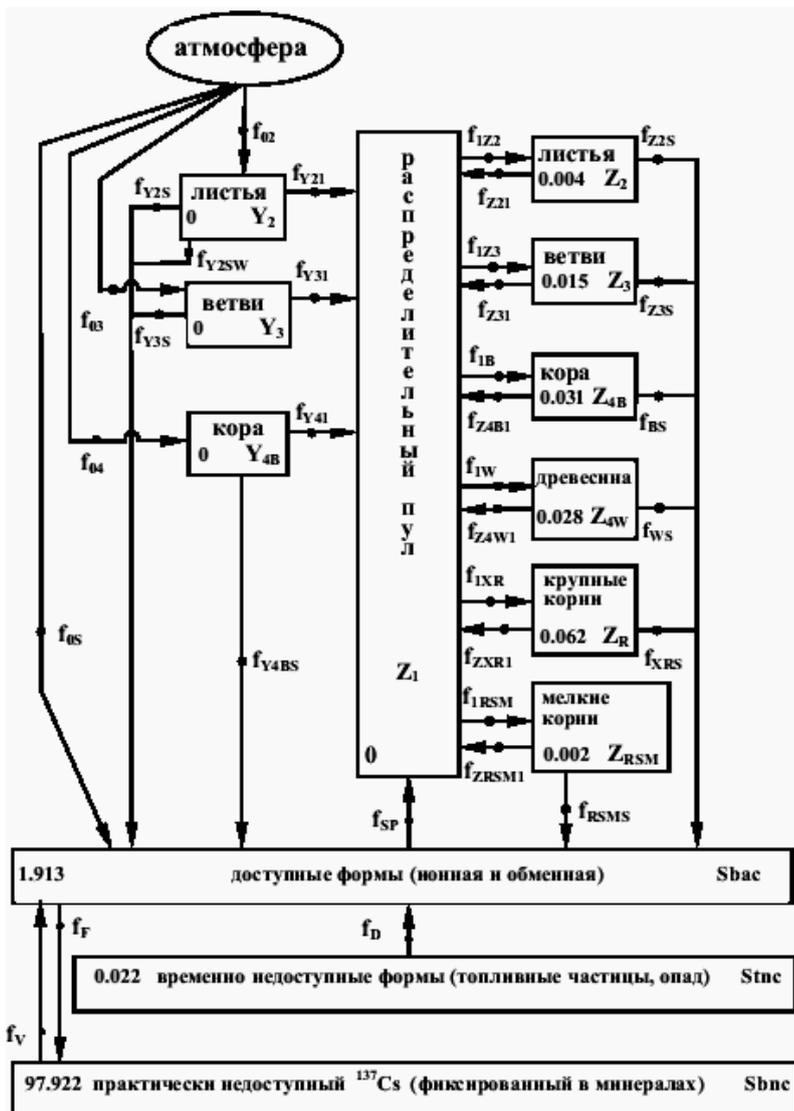
q_1 - в органической форме в щитовидной железе,

q_2 - тело,

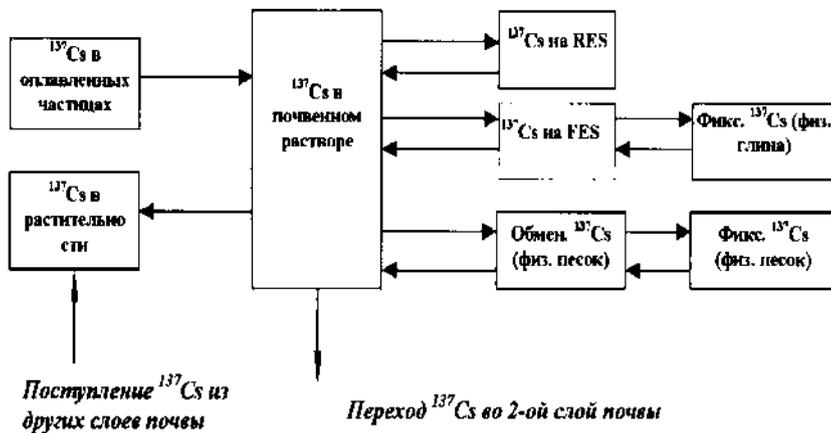
q_3 - ^{131}I в йодидной форме в щитовидной железе,

U - резервуар выведения.

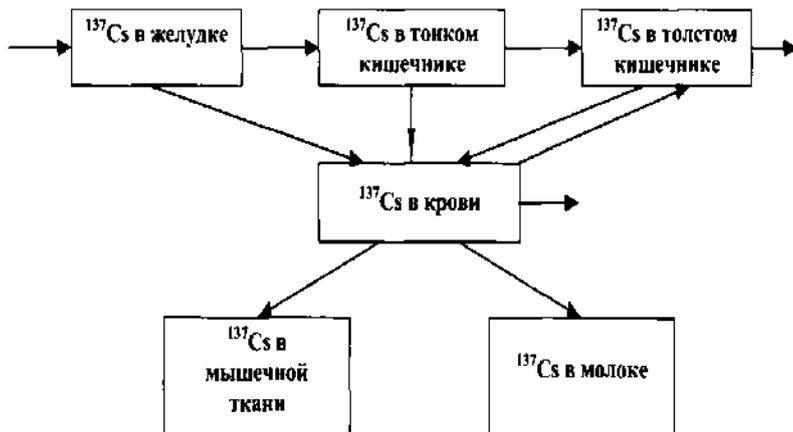
Концептуально-балансовая модель содержания ^{137}Cs в компонентах листовенного леса через 50 лет после однократного выпадения (в левом нижнем углу каждого блока – запас ^{137}Cs в % от общего загрязнения экосистемы) (Мамихин С.В., 2003)



Концептуальная модель поведения Cs-137 в верхнем, 5-см слое почвы (Спиридонов С.И., Мукушева М.К., 2010)



Концептуальная модель поведения Cs-137 в организме лошадей (Спиридонов С.И., Мукушева М.К., 2010)



Приложения

Приложение 1. Соотношение между единицами СИ и внесистемными единицами в области радиационной безопасности

Величина и ее символ	Единица СИ		Внесистемная единица		Соотношение между единицами
	Наименование	Обозначение	Наименование	Обозначение	
Активность <i>A</i>	беккерель	Бк	кюри	Ки	1 Ки = $3,7 \cdot 10^{10}$ Бк
Поглощенная доза <i>D</i>	грей	Гр	рад	рад	1 рад = 0,01 Гр
Экспозиционная доза <i>X</i>	кулон на килограмм	Кл/кг	рентген	Р	1 Р = $2,58 \cdot 10^{-4}$ Кл/кг
Эквивалентная доза <i>H</i> Эффективная доза <i>E</i>	зиверт	Зв	бэр	бэр	1 бэр = 0,01 Зв
Энергия ионизирующего излучения	джоуль	Дж	электрон-вольт	эВ	1 эВ = $1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж

Приложение 2. Десятичные множители и приставки к единицам измерения

Десятичный множитель	Приставка	Обозначение
10^{18}	экса	Э
10^{15}	пета	П
10^{12}	тера	Т
10^9	гига	Г
10^6	мега	М
10^3	кило	к
10^2	гекто	Г
10^1	дека	да
10^{-1}	деци	д
10^{-2}	санти	с
10^{-3}	милли	м
10^{-6}	микро	мк
10^{-9}	нано	н
10^{-12}	пико	п
10^{-15}	фемто	ф
10^{-18}	атто	а

Приложение 2. Гамма-постоянные по мощности поглощенной дозы (Γ_D) и по мощности экспозиционной дозы (Γ_X) для некоторых радионуклидов

Радионуклид	$T_{1/2}$	Γ_D , аГр·м ² /(с·Бк)	Γ_X , Р·см ² /(ч·мКи)
²² Na	2,603 года	77,3	11,8
⁵⁴ Mn	312,2 сут	30,2	4,61
⁵⁹ Fe	44,52 сут	40,5	6,18
⁶⁰ Co	5,273 года	83,8	12,8
⁶⁵ Zn	243,9 сут	20,0	3,06
⁷⁴ As	17,77 сут	28,5	4,35
⁸⁵ Kr	10,73 года	0,0845	0,0129
⁹⁵ Zr+ ^{95m} Nb	64,02 сут	27,0	4,12
⁹⁵ Nb	35,01 сут	28,0	4,27
¹³¹ I	8,054 сут	14,1	2,16
¹³⁴ Cs	2,062 года	57,1	8,72
¹³⁷ Cs+ ^{137m} Ba	30,17 года	21,2	3,24
¹³³ Ba	10,54	19,6	2,99
¹⁴⁰ La	40,28 часа	76,4	11,7
¹⁵⁵ Eu	4,680 года	2,23	0,340
²²⁶ Ra*	1600 лет	59,1	9,03

* – в равновесии с основными дочерними продуктами распада до ²¹⁰Pb.

Литература

Власов В.К., Королев Л.Н., Сотников А.Н. Элементы информатики. М., Наука, 1988, 320 с.

Глаголев М.В., Смагин А.В. Приложения MATLAB для численных задач биологии, экологии и почвоведения. М., МГУ им. М.В.Ломоносова, 2005, 200 с.

Джефферс Дж. Введение в системный анализ: применение в экологии / Пер с англ. О.Д. Логофета; под ред. Ю.М. Свирижева. М., Мир, 1981, 252 с.

Коросов А.В. Имитационное моделирование в среде MS Excel. ПетрГУ, Петрозаводск, 2002, 212 с.

Кудряшов Ю.Б. Радиационная биофизика (ионизирующие излучения). М., ФИЗМАТЛИТ, 2004, 448 с.

Левич А.П. Искусство и метод в моделировании систем: вариационные методы в экологии сообществ, структурные и экстремальные принципы, категории и факторы. М. Ижевск, Институт компьютерных исследований, 2012, 728 с.

Мамихин С.В. Динамика углерода органического вещества и радионуклидов в наземных экосистемах (имитационное моделирование и применение информационных технологий). М., Изд-во Моск. ун-та, 2003, 172 с.

Ризниченко Г.Ю. Лекции по математическим моделям в биологии. Часть 1. Ижевск, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2002. – 232 с.

Рубин А.Б. Биофизика. Т.1, М., “Книжный дом “Университет””, 1999. 448 с.

Смит Дж.М. Модели в экологии. М., Мир, 1976, 184 с.

Спиридонов С.И., Мукушева М.К. Семипалатинский испытательный полигон: радиоэкологические модели и риски. Алматы, 2010, 167 с.

Торнли Д.Г.М. Математические модели в физиологии растений. Киев: Наукова Думка, 1982, с. 310.

Федорец Н. Г., Бахмет О. Н. Экологические особенности трансформации соединений углерода и азота в лесных почвах. Петрозаводск: Карельский научный центр РАН, 2003. 240 с.

Федоров В.Д., Гильманов Т.Г. Экология, М., МГУ, 1980, 464 с.

Шеин Е.В., Рыжова И.М. Математическое моделирование в почвоведении. М.: «ИП Маракушев А.Б.», 2016, – 377 с.

Информационно-учебный ресурс по радиоэкологии, радиобиологии и радиоэкологическому моделированию:
<http://soil.msu.ru/ecoradmod>

Словарь используемых терминов

- Алгоритмический язык** Язык описания алгоритмов для их реализации на компьютере, публикации или формального анализа.
- Аппроксимация** (от латинского *aproximo* – приближаюсь) Построение приближенной (аппроксимирующей) функции, в целом наиболее близко проходящей около данных точек или около данной непрерывной функции.
- База данных** Совокупность связанных объектов, включая таблицы, формы, отчеты, запросы и сценарии, организованная с помощью системы управления базами данных (СУБД).
- Гамма-излучение** Вид электромагнитного излучения с длиной волны менее $2 \cdot 10^{-10}$ м. Его взаимодействие с веществом способно приводить к образованию ионов разных знаков. Гамма-излучение квантовано, испускается при переходах между возбуждёнными состояниями атомных ядер. Гамма-квантами являются фотоны с высокой энергией. Фотон — элементарная частица, квант электромагнитного излучения (в узком смысле — света). Это безмассовая частица, способна существовать в вакууме только двигаясь со скоростью света. Электрический заряд фотона равен нулю.
- Гемопозз** (лат. *haemopoiesis*), кроветворение — это процесс образования, развития и созревания клеток крови — лейкоцитов, эритроцитов, тромбоцитов у позвоночных.
- Грид-вычисления** (англ. *grid* — решётка, сеть) — это форма распределённых вычислений, в которой «вирту-

альный суперкомпьютер» представлен в виде кластеров, соединённых с помощью сети, слабосвязанных гетерогенных компьютеров, работающих вместе для выполнения большого количества заданий (операций, работ). Эта технология применяется для решения научных, математических задач, требующих значительных вычислительных ресурсов.

Интерполяция Нахождение значения таблично заданной функции в тех точках внутри данного интервала, где она не задана.

Интерпретатор Программа или среда программирования, в которой можно транслировать исходный текст разрабатываемой программы и выполнять ее, не получая соответствующий машинный код.

Интерфейс Стандартизированная система сигналов и способов представления информации, предназначенная для обмена информацией между устройствами, входящими в состав компьютера, а также между компьютером и пользователем.

Итерация В программировании – одно повторение оператора или группы операторов, приближающих к решению. В математике – результат повторного применения совокупности математических операций при решении уравнений методом последовательных приближений.

Квантование Операция преобразования аналогового сигнала в дискретный сигнал. Квантование реализуется посредством разбиения диапазона значений аналогового сигнала на конечное число непересекающихся интервалов.

- Конечно-разностные уравнения** Упрощенно – это способ дискретного написания дифференциальных уравнений. Если производная функции – это приращение ее за бесконечно малый промежуток времени, то в случае конечно-разностных уравнений подразумевается некоторое фиксированное приращение аргумента, равное шагу модели.
- Компилятор** Программа, предназначенная для перевода исходного текста разрабатываемой программы с языка программирования высокого уровня в эквивалентную программу на целевом языке (машинный язык процессора).
- Компьютеризация естественных изысканий** Методология, основанная на применении компьютеров и информационно-вычислительных технологий для планирования и проведения полевых, лабораторных и теоретических исследований и накопления, обработки, формализации и анализа их результатов.
- Методы Монте-Карло** Группа численных методов для изучения случайных процессов. Суть метода заключается в следующем: процесс моделируется при помощи генератора случайных величин.
- Объектно-ориентированное программирование** Направление в программировании, заключающееся в представлении данных в виде объектов, обладающих определенными свойствами и содержащих внутри себя как структуры данных, так и процедуры для работы с ними. ООП имеет развитый аппарат и поддерживается большинством современных языков программирования.
- Приложение** Прикладная программа или пакет, которые обеспечивают пользователю решение опреде-

ленной задачи, например, электронная таблица или текстовый процессор.

- Потоковая диаграмма** Наглядное представление о структуре рассматриваемой системы. Компоненты системы изображаются в виде прямоугольников, потоки вещества и энергии – в виде сплошных стрелок, а информационные связи – в виде пунктирных стрелок.
- Радиолиз** Разложение химических соединений под действием ионизирующих излучений. При радиолизе могут образовываться как свободные радикалы, так и отдельные нейтральные молекулы.
- Рандомизация** Метод решения задач по соответствующим образом подобранному вероятностному закону.
- Распределение Пуассона** Относится к числу появления редких (маловероятных) событий в большом числе опытов. Варьирующая величина может принимать только целые значения. Среднее значение величины совпадает с величиной дисперсии.
- Репарация (реституция)** Репарация (от лат. *geratio* – восстановление) – особая функция клеток, заключающаяся в способности исправлять химические повреждения и разрывы в молекулах ДНК, повреждённых при нормальном биосинтезе ДНК в клетке или в результате воздействия физических или химических агентов. Осуществляется специальными ферментными системами клетки.
- Унификация** Рациональное сокращение числа объектов одинакового функционального назначения.
- Формализация** Представление и изучение какой-либо со-

держательной области знаний (научной теории, рассуждений, процедур поиска и т.д.) в виде формальной системы или исчисления; связано с усилением роли формальной логики и математических методов в научных исследованиях.

Цепь Маркова

1. Последовательность случайных событий с конечным или счётным числом исходов, характеризующаяся тем свойством, что при фиксированном настоящем будущее независимо от прошлого.
2. Последовательность трансформации некоторой физической системы, при которой вероятность перехода системы из состояния А в состояние В зависит только от состояния А, даже если известна вся предыстория системы.

Электронная таблица

Приложение, использующее для обработки данных метафору таблицы, ячейки которой можно связать между собой формулами; вычисления в таблице производятся автоматически по мере ввода данных в ячейки.

MATLAB

Интерактивная среда разработки алгоритмов, высокоуровневый язык технических расчетов, инструмент анализа данных. Позволяет на порядок сократить время решения типовых задач и значительно упрощает разработку новых алгоритмов.

MathCad

Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением

В настоящем пособии приводятся теоретические и практические основы применения метода имитационного моделирования, практические задания, справочный и иллюстративный материал по курсам «Экологическая информатика» и «Математическое моделирование в радиобиологии и радиоэкологии» для студентов факультета почвоведения МГУ, обучающихся по направлению подготовки «Экология и природопользование».