

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Забайкальский государственный университет»

А. Н. Шейн
В. В. Потапов

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В РАЗВЕДОЧНОЙ ГЕОФИЗИКЕ**

Учебно-методическое пособие

Чита
Забайкальский государственный университет
2017

УДК 512:550.3(075)
ББК 22.14:26.325я73
Ш 395

Рекомендовано к изданию учебно-методическим советом
Забайкальского государственного университета

Рецензенты

Д. Л. Авгулевич, канд. геол.-минерал. наук,
ЗАО «ПитерГОРпроект», г. Санкт-Петербург
А. А. Дучков, канд. физ.-мат. наук, доцент,
Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск

Шеин, Александр Николаевич

Ш 395 Математическое моделирование в разведочной геофизике : учеб.-метод. пособие / А. Н. Шеин, В. В. Потапов ;
Забайкал. гос. ун-т. – Чита : ЗабГУ, 2017. – 125 с.
ISBN 978-5-9293-2021-7

В учебно-методическом пособии рассмотрены определения и термины, необходимые при математическом моделировании геофизических полей, подходы по интерполяции и аппроксимации геофизических данных. Подробно изложены основные математические методы численного решения алгебраических и дифференциальных уравнений, СЛАУ, интегрирования.

Издание предназначено для студентов специальности 21.05.03 *Технология геологической разведки*, специализация «Геофизические методы поиска и разведки месторождений полезных ископаемых». Может быть полезно геофизикам-интерпретаторам и при изучении дисциплин «Физико-геологическое моделирование», «Комплексирование геофизических методов», «Разведочная геофизика».

УДК 512:550.3(075)
ББК 22.14:26.325я73

ISBN 978-5-9293-2021-7 © Забайкальский государственный
университет, 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
Глава 1. Математические и физико-геологические модели	8
1.1. Этапы решения задач разведочной геофизики	12
1.2. Прямая и обратная задачи	18
1.3. Постановка задачи. Понятие математической модели	21
1.4. Связь математического моделирования с ФГМ	29
1.5. Виды ФГМ	31
1.5.1. <i>Детерминированные ФГМ</i>	33
1.5.2. <i>Статистические (вероятностные) модели. Способы статистического анализа геофизической информации</i>	34
1.5.3. <i>Стохастические модели. Описание неоднородных геологических объектов. Интегральные характеристики стохастических моделей объектов. Модели полей для объектов со случайными параметрами</i>	36
1.5.4. <i>Динамические ФГМ</i>	39
1.6. Виды математических моделей	40
Глава 2. Численные методы	42
2.1. Алгебраические и трансцендентные уравнения	45
2.1.1. <i>Метод бисекций или метод деления отрезка пополам</i>	48
2.1.2. <i>Метод хорд, метод секущих</i>	50
2.1.3. <i>Метод Ньютона (метод касательных)</i>	54
2.1.4. <i>Метод простых итераций</i>	55
2.2. Системы линейных алгебраических уравнений	61
2.2.1. <i>Метод Крамера</i>	62
2.2.2. <i>Метод Гаусса</i>	66
2.2.3. <i>Итерационные методы</i>	69
2.3. Интерполяция и аппроксимация	75

2.3.1. Интерполяция каноническим полиномом Интерполяция полиномом Лагранжа. Полином Ньютона и сплайн-интерполяция	78
2.3.2. Аппроксимация данных. Уравнение линейной регрессии	87
2.3.3. Методы оптимизации	93
2.4. Численное интегрирование	99
2.4.1. Методы прямоугольников	102
2.4.2. Методы Ньютона – Котеса: формула трапеций. Метод Симпсона	105
2.4.3. Квадратурные формулы Гаусса и понятие погрешности при численном интегрировании	109
2.5. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений	114
2.5.1. Метод Эйлера, метод Рунге – Кутты	116
Заключение	122
Библиографический список	123

ВВЕДЕНИЕ

С различными моделями и процессом моделирования человек начинает сталкиваться с самого раннего детства. Так, ещё не научившись уверенно ходить, малыш начинает играть с кубиками, сооружая из них (на первых порах с помощью старших) различные конструкции (точнее, модели последних). Его окружают разнообразные игрушки: плюшевые, резиновые, металлические, различающиеся размерами, формой, цветом, предназначением и т. д. При этом большинство игрушек в большей или меньшей степени воспроизводят (моделируют) отдельные свойства и форму реально существующих предметов и объектов. В этом смысле такие игрушки также можно рассматривать в качестве моделей соответствующих объектов.

В школе практически всё обучение построено на использовании моделей в той или иной форме. Действительно, для знакомства с основными конструкциями и правилами родного языка используются различные структурные схемы и таблицы, которые можно считать моделями, отражающими свойства языка. Процесс написания сочинения следует рассматривать как моделирование некоторого события или явления средствами родного языка. На уроках биологии, физики, химии и анатомии к плакатам и схемам (т. е. моделям) добавляются макеты (тоже модели) изучаемых реальных объектов. Так можно продолжать до бесконечности. Всю жизнь нас сопровождают модели и моделирование [5].

Если в повседневной жизни мы на каждом шагу сталкиваемся с моделированием, то нет сомнений, что трудно будет найти такую отрасль науки или техники, в которой не использовалось бы моделирование для исследования общих закономерностей изучаемых процессов и решения прикладных задач технического характера. В науках о Земле приоритет в этой области принадлежит геофизикам, которые стали использовать модельные представления с момента зарождения геофизических методов исследований в 20-х гг. прошлого столетия. Примером таких представлений может служить ставшее классическим понятие возмущающего объекта, под которым понимается объём

геологического пространства, ответственный за формирование аномальной составляющей того или иного физического поля. Это понятие положено в основу расчёта ожидаемых аномальных эффектов, оно помогает корректировать представления о реальных причинах наблюдаемых геофизических полей, формировать хотя бы на качественном уровне представления о форме, структуре, условиях залегания и других характеристиках геологических тел.

Современное развитие вычислительной техники существенно расширило возможности численных методов решения прямых и обратных задач геофизической разведки. Появляются всё более сложные математические модели, которые позволяют рассчитать физические поля с учётом всё большего числа факторов (параметров геологической среды). Тем не менее, несмотря на засилье программных средств для численных исследований, в геофизике широко используется физическое моделирование, где также постоянно совершенствуются технические возможности [4].

В данном пособии речь пойдёт в основном о простейших численных методах, применяемых в моделировании. Но в первой главе всё же будут даны общие понятия и краткое описание видов математических моделей. Нетрудно понять, что математическое моделирование было неразрывно связано с необходимостью построения сложных физико-геологических моделей (ФГМ). ФГМ, формируемая обычно методом последовательных приближений, служит не только основой для последующего построения широкого класса моделей, но и сама является продуктом математического и физического моделирования. Поэтому, помимо общих принципов построения математической модели, в первой главе будет кратко рассмотрено понятие ФГМ.

Во второй главе будут разобраны простейшие численные методы решения уравнений, систем линейных уравнений. Необходимо отметить важный пункт о методах аппроксимации и интерполяции, без чего современная геофизика (наука вообще,

и геофизика в частности) не может существовать. В конце главы представлены методы численного интегрирования и решения (интегрирования) дифференциальных уравнений.

Нужно отметить, что все методы и задачи, рассмотренные в данном пособии, сопровождаются примерами с подробным решением. Для наглядности примеры использования некоторых численных методов представлены в MSExcel и выложены в свободном доступе в сети Интернет по адресу: <http://www.geoelectriclab.com/ZabSU/MMvG>.

ГЛАВА 1

Математические и физико-геологические модели

...опыт показывает, что во многих случаях правильно выбрать модель – значит решить проблему более чем наполовину.

Академик А. Н. Тихонов

Прежде чем переходить к понятию математической модели, мы ещё раз убедимся, насколько сильно сплетены между собой математическое моделирование и геофизическая отрасль. Для этого приведём понятие разведочной геофизики и разберем её этапы, прослеживая зависимость каждого из них от моделирования.

Разведочная геофизика (геофизические методы разведки месторождений полезных ископаемых) – раздел геофизики, изучающий пространственно-временное изменение геофизических полей в земной коре, главным образом с целью поисков и разведки месторождений полезных ископаемых, контроля их разработки, решения инженерно-геологических задач (при строительстве крупных сооружений дорог, нефтепроводов и др.), археологических поисков. Данные разведочной геофизики используются также при решении фундаментальных проблем наук о Земле (геодинамики, геохронологии, стратиграфии и др.), для литомониторинга и разработки мер по охране окружающей среды.

Исторический очерк. Зарождение разведочной геофизики связано с развитием геофизики, физики, механики, астрономии и геодезии, в рамках которых были заложены основы отдельных методов разведочной геофизики. Как самостоятельная наука разведочная геофизика оформилась в начале XX в., когда отдельные методы развились настолько, что стало возможным их применение для решения геологических задач. Наибольший вклад в решение фундаментальных проблем, разработку теории и физико-геологических основ разведочной геофизики внесли русские и советские учёные. Первым, обратившим внимание на связь силы гравитации тяжести с наличием тяжёлых

тел в Земле, был М. В. Ломоносов (1753). В 1783 г. П. Б. Иноходцевым по отклонению стрелки компаса была открыта Кургская магнитная аномалия (КМА). В 1872 г. И. И. Стебницкий по уклонению отвеса предположил наличие погребённых аномальных масс в восточном Закавказье. В конце XIX в. Д. И. Менделеев провёл геомагнитные съёмки на Урале и в Кривом Роге. В начале XX в. Е. И. Рогозин предложил использовать электрические методы для поисков руд, В. И. Вернадский высказал идею об использовании естественной радиоактивности для поисков руд урана и радия. В 1911 г. Б. Б. Голицын показал возможности использования упругих волн, возникающих при землетрясениях и взрывах, для изучения строения земной коры.

В 1919 г. по указанию В. И. Ленина были начаты исследования КМА, где впервые с разведочной целью использовались магнитный и гравиметрический метод. Эти работы, выполненные О. Ю. Шмидтом, П. П. Лазаревым, П. Н. Никифоровым, Л. В. Сорокиным, А. И. Заборовским, Б. В. Яновским, Г. А. Гамбурцевым и другими учёными, имели принципиальное значение для развития разведочной геофизики в целом. В 1923 г. В. С. Воюцким запатентован метод отражённых волн. В 1920-е гг. возникли отдельные исследовательские центры по разведочной геофизике: в 1920 г. – Институт физики и биофизики в Москве (М. П. Воларович, М. И. Поликарпов, Н. К. Шдро), в 1923 г. – НИИ прикладной геофизики в Ленинграде (А. А. Петровский, В. И. Бауман, Б. В. Нумеров, Л. Я. Нестеров).

В 1930-е гг. в СССР создаётся геофизическая служба для использования разведочной геофизики в геологоразведочном процессе. Особая роль в развитии отечественной сейсморазведки принадлежит Г. А. Гамбурцеву, выполнившему первые сейсмические исследования методом преломлённых волн и методом отражённых волн на Байкале (1934). В 1938 г. Г. А. Гамбурцевым с участием Ю. В. Ризниченко, И. С. Берзон, А. М. Епинатьевой, Е. В. Каруса был предложен и разработан корреляционный метод преломлённых волн (КМПВ) и на его основе развит, совместно с П. С. Вейцман, Ю. Н. Годиным, И. П. Косминской и другими исследователями, метод глубин-

ного сейсмического зондирования (ГСЗ). В 1936 г. А. А. Логачёвым выполнены первые работы по созданию аэрогеофизических методов. В 1937 г. Л. А. Рябинкиным предложен метод регулируемого направленного приёма.

В 1940–1950-е гг. разведочная геофизика получила интенсивное развитие, когда были разработаны теоретические и методические основы важнейшего метода разведочной геофизики – сейсморазведки (Ю. В. Ризниченко, И. С. Берзон, И. И. Гурвич и др.). Создавались и широко развивались различные модификации геофизических исследований в скважинах (Л. М. Альпин, В. Н. Дахнов, С. Г. Комаров). Предложены методы акустического (Ю. В. Ризниченко, Е. В. Карус, 1954), импульсного нейтронного (Г. Н. Флёров, Ю. С. Шимелевич, 1959) и гамма-плотностного (Ю. П. Булашевич, 1957) каротажа, вертикальное сейсмическое профилирование (Е. М. Гальперин, 1955), метод поперечных волн (Г. А. Гамбурцев, Н. Н. Пузырёв) и начато их внедрение. Созданы электромагнитные методы изучения геологического строения (А. Н. Тихонов, М. Н. Бердичевский, Л. Л. Ваньян, Б. С. Эненштейн и др.) и поиска рудных месторождений (радиоволновое просвечивание – А. Г. Тархов, метод заряда – А. С. Семёнов, пьезоэлектрический метод – М. П. Воларович). В 1950-е гг. выполнены первые работы в области геотермических поисков и разведки месторождений (Е. А. Любимова), по совершенствованию способов интерпретации данных геофизических полей (В. Н. Страхов и др.), по созданию высокоточных гравиметров, в том числе для измерения в движении (Ф. Д. Буланже, М. С. Молоденский, В. В. Федынский). В 1940–1950-е гг. произошли существенные изменения в организации научных исследований в области разведочной геофизики. Были созданы крупные специализированные всесоюзные научно-исследовательские институты: геофизических методов разведки (ВНИИГеофизика), ядерной геофизики и геохимии (ВНИИЯГГ) – в Москве; разведочной геофизики (ВИРГ) – в Ленинграде; геофизических исследований в скважинах (ВНИИГИС) – на Урале и других городах. В 1960–1980-е гг. проведены работы по широкому внедрению автоматизирован-

ных исследований, полной компьютеризации обработки геофизических данных (М. К. Полшков, Е. А. Козлов, Н. Н. Сохранов, Г. Н. Гогоненков, Б. Е. Векслер и др.). Создана принципиально новая методология геофизических исследований с применением управляемых сильных полей, взаимодействие которых со средой характеризуется нелинейной зависимостью (О. Л. Кузнецов, Ю. С. Шимелевич).

За рубежом наибольший вклад в развитие разведочной геофизики внесли Андрия Мохоровичич (Югославия), Бено Гутенберг (Германия), братья Шлюмберже, Дж. Клаербут (США) и др.

Разведочная геофизика основана на измерении естественных (геомагнитных, гравитационных, электромагнитных, геотермических, ядерно-физических полей и упругих колебаний) и искусственно создаваемых полей (электрогенераторами, взрывами и невзрывными источниками, источниками ионизирующих излучений), изменения которых определяются неоднородностью состава, строения, изменчивостью свойств земной коры и процессами, в ней происходящими. Методы искусственных полей обладают большей разрешающей способностью и достоверностью, естественных полей – более высокой экономической эффективностью. Геофизические исследования проводятся из космоса и в атмосфере, со спутников, самолётов и вертолётов (космогеофизическая и аэрогеофизическая разведка), на акваториях с морских судов (морская геофизическая разведка), на земной поверхности (полевая геофизика), под землёй в скважинах (скважинная геофизика) и в подземных горных выработках – подземная, или шахтно-рудничная, геофизика.

Разведочная геофизика тесно связана с науками о Земле: общая и региональная геология, стратиграфия, инженерная геология, поиски и разведка полезных ископаемых, минералогия, петрография, горные науки, а также с физическими, математическими и техническими науками.

Как становится понятно, в геофизике существует множество методов исследования, каждый метод может делиться ещё

на несколько модификаций и т. д. Но в каждом из методов, в каждой из модификаций метода неизменно одно – этапы решения задачи, которая возникла перед геофизиком.

1.1. Этапы решения задач разведочной геофизики

1-й этап. Проектирование (сбор априорной информации, моделирование)

При выборе методики исследования большую роль играет как *математическое*, так и *физическое моделирование*: используется для изучения распределения в пространстве (или во времени) конкретного параметра поля (или его компонент) для заданной физико-геологической модели, характера и расположения источников поля. Определение параметров физического поля по известным физическим свойствам, размерам и форме геологических объектов называется математическим решением **прямой задачи геофизики**.

Другими словами, для проектирования работ нужно понять, какой метод будет эффективен на конкретном заданном объекте (исследуется чувствительность метода к объекту), какие установки нужно применить и т. д. Например, при подготовке к работам методом ЗСБ, с помощью предварительного прямого моделирования определяется размер генераторных и измерительных петель. Для электротомографии исследуется оптимальный межэлектродный шаг и/или расположение профилей.

Сущность моделирования сводится к аппроксимации (некоторому приближению) разведываемых объектов априорными (известными по имеющимся данным) моделями, т. е. телами простой геометрической формы (шар, столб, цилиндр, пласт и др.) или сложной формы с разными контрастностями их физических свойств по сравнению с окружающей средой. Пример такой модели приведён на рис. 1.1, где изображён один из возможных вариантов упрощённой геоэлектрической модели кимберлитовой трубки. Для выбранных моделей рассчитываются и анализируются поля (решаются прямые задачи).

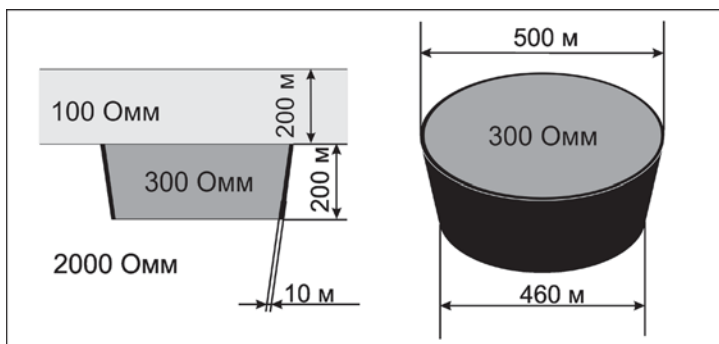


Рис. 1.1. Один из возможных вариантов упрощённой геоэлектрической модели кимберлитовой трубки

После того, как мы определились с методом, размерами установок и другими параметрами наблюдений, мы можем переходить ко второму этапу решения задач геофизических.

2-й этап. Полевые наблюдения (опытно-методические работы, производственные работы)

Для проведения полевых наблюдений используется *аппаратура геофизических методов* исследования, основанная на использовании механики, электроники, автоматики, вычислительной техники, т. е. способы измерений – физико-технические. Работы проводятся по выбранной на первом этапе *методике* (способу) проведения работ, которая сводится к профильным, а чаще площадным геофизическим съёмкам.

Результатом геофизических съёмок являются графики и карты наблюдаемых параметров поля. Их обработка состоит из трансформаций (преобразований) наблюдаемых полей, качественного (визуального) выделения аномалий, их физико-математической интерпретации, выполняемой с помощью компьютеров. Все эти действия можно назвать предварительной (первичной) обработкой. **Математическое моделирование** на данном этапе также присутствует в больших объёмах – на этом этапе требуется следить за качеством сигналов, строить предварительные разрезы для корректировки работ и сравнения апри-

орной информации с полученными картами или разрезами. И уже качественный материал мы отправляем на третий этап – обработку.

3-й этап. Обработка и интерпретация данных (предварительная и углублённая)

Сущность интерпретации заключается в изменении параметров искомой модели с целью нахождения такого набора, чтобы **теоретический расчёт поля (смоделированное поле)** и измеренный экспериментально сигнал имели минимальное расхождение (другими словами измеренный и рассчитанный сигналы должны совпадать). Подбор соответствующих параметров называется **решением обратной задачи**. Полученная таким образом модель среды и является наиболее вероятным результатом интерпретации. Вместе с тем одно и то же распределение параметров физического поля может соответствовать различным соотношениям физических свойств и размеров геологических объектов. Иными словами, математическое решение обратной задачи геофизики (как и вообще математической физики), т. е. определение размеров геологических объектов и свойств слагающих их пород по наблюдаемому полю, не только значительно сложнее, но и, как правило, неоднозначно. Чтобы получить более однозначную интерпретацию, нужна дополнительная информация: сведения о физических свойствах пород, например, по геофизическим исследованиям скважин (ГИС) или другим геолого-геофизическим методам. Все эти усилия направлены на то, чтобы перейти к последнему этапу решения геофизической задачи.

4-й этап. Геологическая интерпретация

Наиболее ответственным и трудоёмким этапом является геологическая интерпретация, при проведении которой геофизическая информация используется в сочетании с данными других видов наблюдений (бурение, геохимия и др.). Геологическое истолкование геофизических данных основывается на полнейшем использовании всей качественной и особенно количественной параметрической геологической информации. С её

помощью устанавливаются теоретические, логические или статистические связи между геолого-геофизическими характеристиками среды, полученные на эталонных и опорных точках, которые переносятся на все рядовые точки наблюдения. Казалось бы, что здесь не применяется математическое моделирование, но геолог-интерпретатор использует полученные на этапе обработки модели и зачастую уточняет эти модели, которые необходимо заверить повторно, а иногда и категорически переосчитать.

Как мы видим, на каждом этапе решения геофизической задачи в той или иной степени применяется математическое моделирование. Рассчитываются геофизические поля, которые изменяются в зависимости от параметров модели. Как раз в зависимости от этих полей и происходит классификация методов разведочной геофизики. В зависимости от вида исследуемого поля или его отдельных параметров выделяют различные модификации методов разведочной геофизики. При гравиметрической разведке измеряют ускорение силы тяжести или производные потенциала силы тяжести (вариометрия); при магнитной разведке – модуль полного вектора индукции геомагнитного поля либо его компонентов или их производные (магнитная градиентометрия). Сейсмическая разведка основана на изучении скорости распространения и поглощения отражённых сейсмических волн (метод отражённых волн и его основная модификация), преломлённых волн (метод преломлённых волн) либо на одновременной регистрации нескольких типов волн (многоволновая сейсмика). Геотермические методы базируются на изучении характеристик теплового поля Земли, создаваемого тепловым потоком, идущим с глубин, и локальными источниками (горячие воды, экзотермические реакции в горных породах и др.). Методами электрической разведки исследуются потенциал или напряжённость постоянного электрического поля (например, методы сопротивления и др.) либо амплитудные и фазовые характеристики электрического или магнитного компонента переменного электромагнитного поля (методы становления поля, вызванной поляризации, частотного зонди-

рования, магнитотеллурические и др.). Ядерно-физическими методами исследуют ионизирующие излучения (естественные или искусственно вызванные) в горных породах. Измеряют гамма-излучение в интегральном и спектральном вариантах (гамма-спектрометрия), потоки нейтронов различной энергии (нейтронометрия) и др. Всё перечисленное выше можно свести в таблицу классификации геофизических методов по природе используемых полей (см. табл. 1.1).

Таблица 1.1

**Классификация геофизических методов
по природе используемых полей**

<i>Название метода</i>	<i>Используемые поля</i>	<i>Основные параметры поля</i>	<i>Основные свойства среды, определяемые при количественной интерпретации</i>
Гравиразведка	Гравитационное поле Земли	Δg	σ – плотность пород
Магнито-разведка	Постоянное магнитное поле Земли	ΔT	$\acute{\alpha}$ – магнитная восприимчивость
Электро-разведка	Постоянные электрические и переменные электромагнитные поля, естественные и искусственные	E, H	ρ – удельного электрического сопротивления пород, диэлектрической (ϵ) и магнитной (μ) проницаемостей, поляризуемость (η)
Сейсмо-разведка	Поля упругих волн, естественные и искусственные	t_p, t_s	Скорости V_p, V_s
Терморазведка	Тепловое поле Земли	t_0	Интерпретация качественная
Ядерная геофизика	Поля вызванной и естественной радиоактивности	I	Интерпретация качественная

Специфическим разделом разведочной геофизики являются геофизические исследования в скважинах (ГИС). Наиболее эффективны методы электрометрии (каротаж сопротивления, диэлектрический каротаж и др.), геоакустики (акустический каротаж, акустическое прозвучивание) и ядерно-физические ме-

тоды (импульсный нейтронный и ядерно-магнитный каротаж, гамма-спектрометрия и др.). Широко используются геофизические методы контроля технологии бурения и технического состояния скважин (инклинометрия, кавернометрия, определение качества цементирования обсаженных скважин, прогноза буримости пород, зон аномального пластового давления и методы вскрытия пластов – перфорации и бокового отбора керна) и методы ликвидации аварий при бурении (определение мест прихвата и его ликвидация).

Методы разведочной геофизики являются важнейшей составной частью технологии всех стадий геологоразведочного процесса и служат информационной основой в первую очередь для его оптимизации. При региональном изучении глубинных зон земной коры наиболее эффективно применение аэрокосмических методов (оптических, радиоволновых, аэрогамма-методов, аэромагнитной и аэроразведки) и глубинных полевых и морских методов. При поисках месторождений превалирует комплексное использование полевых методов (сейсморазведка, электроразведка, грави- и магнитометрия в сочетании с наблюдениями в скважинах). Конечной целью на этой стадии является определение мест заложения скважин, прямой прогноз строения геологического разреза и контуров месторождений. На стадии оценки месторождений и подсчёта запасов широко применяются методы ГИС и подземной геофизики. Рациональным является комплексирование разведочной геофизики с геохимическими методами. Геофизические исследования позволяют сократить объём дорогостоящих буровых работ и более достоверно вести подсчёт запасов месторождений полезных ископаемых.

Таким образом, разведочная (прикладная) геофизика и скважинная (промысловая) геофизика – это многогранные научно-прикладные дисциплины со сложной структурой. Существуют разные подходы к их классификации, один из основных приведён в табл. 1.1. В табл. 1.2 приведён ещё ряд разновидностей геофизических исследований.

Таблица 1.2

Виды и классификации геофизических методов

<i>Направление классификации</i>	<i>Виды (разделы) геофизики</i>
По технологиям и месту проведения работ	Наземная геофизика Шахтно-рудничная геофизика Геофизические исследования скважин Акваториальные Аэрокосмические
По прикладным направлениям и решаемым задачам	Глубинная Региональная Разведочная Инженерная Экологическая геофизика
По видам деятельности	Теоретическая Инструментальная Экспериментальная Вычислительная и интерпретационная геофизика

Главные направления развития разведочной геофизики: конструирование технических средств регистрации параметров геофизических полей и машинной обработки данных, резко уменьшающих трудовые и экономические затраты; разработка научных основ интегрированной обработки и системного анализа разноразмерной (космос, воздух, земля, скважина) комплексной геолого-химико-геофизической информации.

1.2. Прямая и обратная задачи

Существует множество задач, связанных с математическим моделированием. Надо придумать основную схему моделируемого объекта, воспроизвести его в рамках идеализаций данной науки. Так, вагон поезда превращается в систему пластин и более сложных тел из разных материалов, каждый материал задаётся как его стандартная механическая идеализация (плотность, модули упругости, стандартные прочностные характеристики), после чего составляются уравнения, по дороге какие-то детали отбрасываются как несущественные, производятся расчёты,

сравниваются с измерениями, модель уточняется, и так далее. Однако для разработки технологий математического моделирования полезно разобрать этот процесс на основные составные элементы. Традиционно выделяют два основных класса задач, связанных с математическими моделями: прямые и обратные.

Прямая задача: структура модели и все её параметры считаются известными, главная задача – провести исследование модели для извлечения полезного знания об объекте. Какую статическую нагрузку выдержит мост? Как он будет реагировать на динамическую нагрузку (например, на марш роты солдат, или на прохождение поезда на различной скорости), как самолёт преодолеет звуковой барьер, – вот типичные примеры прямой задачи. В простейшем случае прямая задача очень проста и сводится к явному решению уравнения. Например, в законе Ома известно сопротивление R и сила тока I . Прямая задача, в данном случае, заключается в определении напряжения в цепи: $U = I \cdot R$.

Прямая задача геофизики сводится к расчёту аномально-го физического поля по известным параметрам возмущающего объекта. Параметрами объекта являются: мощность, глубина залегания верхней и нижней кромок, угол падения, намагниченность, плотность и т. п. **Прямую задачу геофизики** обычно решают на стадии проектирования геофизических работ. Получаемая при этом ожидаемая геофизическая аномалия помогает выбирать соответствующую измерительную аппаратуру и методику наблюдений.

Обратная задача: известно множество возможных моделей, надо выбрать конкретную модель на основании дополнительных данных об объекте. Чаще всего структура модели известна, и необходимо определить некоторые неизвестные параметры. Дополнительная информация может состоять в дополнительных эмпирических (априорных) данных, или в требованиях к объекту (задача проектирования). Дополнительные данные могут поступать независимо от процесса решения обратной задачи (пассивное наблюдение) или быть результатом специально планируемого в ходе решения эксперимента (активное наблюдение).

Одним из первых примеров виртуозного решения обратной задачи с максимально полным использованием доступных данных был построенный Ньютоном метод восстановления сил трения по наблюдаемым затухающим колебаниям. Если обратиться к уже упомянутому закону Ома, то здесь обратной задачей будет нахождение сопротивления по измеренным силе тока I и напряжению U : $R = \frac{U}{I}$.

Обратная задача геофизики – определение по наблюдаемым аномалиям (полученным в результате полевых измерений) расположения вызывающих аномалии объектов, их геометрических и физических параметров. В сложных случаях получают приближённое решение обратной задачи либо несколько решений, часть из которых отбрасывается при введении дополнительных ограничений.

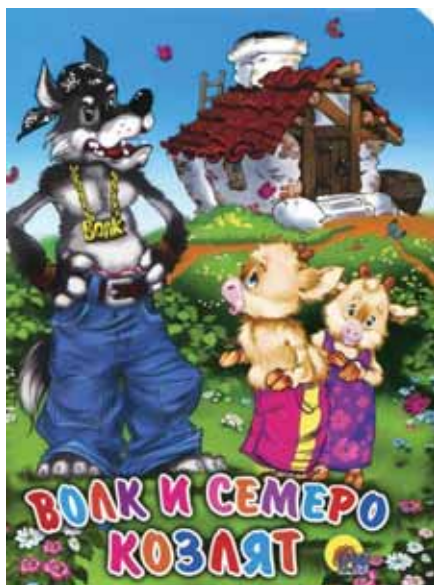


Рис. 1.2. Пример некорректной задачи

Обратную задачу геофизики, чаще всего, решают на этапе интерпретации геофизических данных. К сожалению, неред-

ко она может иметь несколько возможных вариантов решения, так как одному заданному распределению физического поля теоретически может отвечать множество так называемых эквивалентных геологических разрезов. В этом проявляется многозначность интерпретации геофизических данных. Такие **обратные задачи называются некорректными** (см. рис. 1.2). Её устраняют привлечением независимых результатов других геологических или геофизических методов. Можно привести хороший шуточный пример привлечения дополнительных данных, которым не воспользовались – это семеро козлят из известной сказки. Козлята оказались в трудной ситуации, когда по одному *параметру* – тону голоса существа, поющего им из-за двери известную песенку, они пытались решить задачу – «Кто же там за дверью?». Как показал их печальный опыт, задача оказалась *некорректной, с эквивалентностью* – и Коза, и Волк пели одинаково (или неразличимо похоже). Геофизик мог бы посоветовать козлятам попробовать добыть *дополнительную априорную информацию*, например, узнать цвет шерсти стоящего за дверью или длину его хвоста, или определить наличие рогов. Тогда бы козлятам не пришлось решать *некорректную* задачу методом «тыка», и они выбрали бы решение более *обоснованно* и с менее трагическими последствиями.

1.3. Постановка задачи. Понятие математической модели

Прежде чем разбирать общую схему построения математической модели, разберём простой механический пример. Пусть груз массы m колеблется в горизонтальной плоскости под действием пружины нулевой массы с жесткостью k (см. рис. 1.3). Предположим, что противодействующие силы (например, сила трения) пренебрежимо малы, а нас интересуют характер и частота колебаний.

Пусть ось x направлена вдоль линии колебаний, а начало отсчёта соответствует равновесному положению груза, тогда в любой точке x на груз действует сила $F = -kx$. Согласно второму закону Ньютона ($F = ma$, a – ускорение) состояние рассма-

триваемой системы может быть описано дифференциальным уравнением, которое и будет являться математической моделью описанного процесса

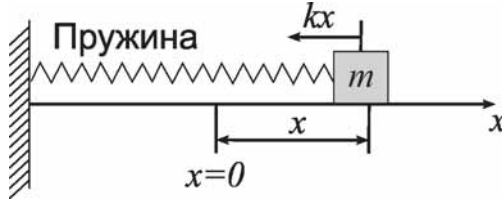


Рис. 1.3. Иллюстрация модели колебания груза на пружине

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + kx = 0,$$

с общим решением

$$x = C_1 \cos \sqrt{\frac{k}{m}} t + C_2 \sin \sqrt{\frac{k}{m}} t.$$

Здесь C_1 , C_2 – произвольные постоянные, определяемые, например, из начальных условий. Интерпретация результата не представляет сложности – груз совершает гармонические колебания с центром в точке $x = 0$ с произвольной амплитудой и с частотой $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.

Теперь разберём общую схему построения математической модели, для наглядности попутно обращаясь к разобранным примерам. Нужно понять, какие именно свойства \mathcal{S} объекта, явления или процесса мы хотим исследовать. В разобранных случаях – это **характер и частота колебания** груза, колеблющегося под действием пружины – реальный объект \mathbf{a} . Термин «реальный объект» включает в себя как собственно объект, так и ситуацию, явление, процесс и т. д. Для того, чтобы описать эти свойства, мы должны «перевести» объект \mathbf{a} на математический язык, т. е. построить в каком-то смысле отображение $\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}'$, где \mathbf{a}' – математический объект (система соотношений, уравнений или геометрических фигур). Как нетрудно понять, в разобранном примере – \mathbf{a}' это формула $m \frac{d^2 x}{dt^2} + kx = 0$. После перевода

нашего объекта на математический язык мы можем сделать содержательные выводы о свойствах S реального объекта a . Если эти выводы качественны и точны в достаточной для нас степени, тогда a' называется математической моделью объекта a относительно совокупности S его свойств (см. рис. 1.4).



Рис. 1.4. Схема построения математической модели

Процесс построения математической модели проходит через несколько стадий, первой из которых является наблюдение. В результате наблюдения интересующих нас свойств реального объекта мы формулируем их на языке той отрасли науки, которая изучает эти свойства – строим механическую, физическую, химическую, биологическую, экономическую или иную модель объекта. Такая модель называется содержательной (см. рис. 1.5). При построении содержательной модели формулируются и используются соответствующие гипотезы (или постулаты). При этом несущественное для описания интересующих нас свойств отбрасывается. На основе содержательной модели и принятых определяющих соотношений мы выписываем соответствующие ей уравнения, переводя тем самым модель на формальный математический язык. В качестве определяющих соотношений, например, в физике, используются универсаль-

ные физические законы (законы сохранения, симметрии и др.) и феноменологические законы, присущие данной более узкой отрасли науки (законы Гука, Фурье, Стефана и др.).

Следующий этап моделирования относится уже к сфере решения полученных уравнений. Чаще всего выведенные уравнения (системы уравнений) нельзя решить в явном виде (найти аналитическое решение) и поэтому прибегают к помощи ЭВМ. Методы, позволяющие реализовать такую задачу, называются **численными методами** и некоторые из них будут рассмотрены во второй главе пособия.



Рис. 1.5. Общая схема применения математики при построении математической модели

Если вернуться к нашему разобранному механическому примеру, на этапе построения содержательной модели мы применили второй закон Ньютона ($F = ma$, a – ускорение), воспользовались эмпирической гипотезой о линейной зависимости силы упругости от её растяжения $F = -kx$ и пренебрегли противодействующими силами и массой пружины. Таким образом, набор всех этих уравнений, предположений и гипотез – есть содержательная модель. В результате всех законов, гипотез

и отбрасывания несущественных, с нашей точки зрения, свойств мы получаем уравнение математической модели процесса колебания груза на пружине $m \frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$ [8; 11].

Если мы нашли решение модельного уравнения, нужно провести анализ полученного решения с точки зрения физического смысла. По существу, это следующий (и необходимый!) этап математического моделирования – интерпретация (истолкование) результата исследования математической модели. Этот этап, как правило, включает в себя и верификацию модели – контроль правильности модели на основе сравнения результата с другими известными фактами, в частности, с экспериментальными данными. При проведении такого исследования или интерпретации решения может понадобиться уточнить или даже существенно изменить математическую модель.

Что касается разобранный примера, то наша математическая модель имеет аналитическое решение, и его адекватность не вызывает сомнений – известно, что это гармонические колебания.

Все указанные этапы взаимосвязаны – при построении математической модели мы заранее ориентируемся на предполагаемый метод решения математической задачи и на качественные свойства получаемого решения (например, точное аналитическое решение, пригодное для глубоких исследований зависимостей от различных параметров, или численный результат для непосредственного применения в конструировании).

Принято считать, что ко всем математическим моделям предъявляются определённые требования и принципы.

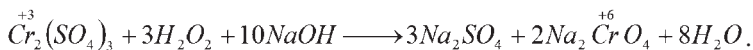
Основные требования к модели

Важнейшим требованием, предъявляемым к модели, является **требование её адекватности**, т. е. правильного соответствия изучаемому реальному объекту ***a***, относительно выбранной системы ***S*** его свойств. Под этим прежде всего понимается правильное качественное описание рассматриваемых свойств

объекта: например, как в случае колебания груза, на основании исследования модели сделать правильный вывод о характере колебаний объекта.

Кроме того, в требование адекватности обычно входит и правильное количественное описание этих свойств, с некоторой разумной (удовлетворяющей нас) точностью.

Немаловажно также **требование правдоподобности модели**. Оно тесно связано с требованием адекватности, однако далеко не эквивалентно ему. Покажем это на простом примере. Рассмотрим уравнение окислительно-восстановительной реакции, хорошо известное из школьного курса химии.



Это довольно точная количественная модель, но как качественная не выдерживает никакой критики. Дело в том, что приведённое уравнение абсолютно неправдоподобно, так как предполагает, что в одной точке сталкиваются сразу 4 молекулы – одна молекула сульфата хрома и 3 молекулы перекиси водорода, не считая 10 молекул едкого натра (можно, конечно, просто считать, что реакция проходит в сильнощелочной среде). Поэтому такая модель является по существу, «чёрным ящиком» – мы знаем, что происходит на «входе» и что получается на «выходе», тогда как истинный механизм реакции остаётся неизвестным (в силу высокой скорости реакции в растворе, присущей многим неорганическим реакциям, можно предположить, что она носит цепной характер).

Следующим важным требованием является **требование достаточной простоты**. На первый взгляд, это требование прямо противоречит адекватности – чем модель сложнее, тем более подробно она описывает реальный объект, так как мы можем учесть большее число факторов. Так, например, если мы введём в приведённую выше модель колебания груза на пружине силу трения, то такая модель будет более адекватна: мы можем уточнить влияние малого трения на частоту колебаний. Однако это далеко не всегда так. Часто возникают случаи, когда

усложнение модели одновременно снижает её адекватность. К таким случаям зачастую приводит шаблонный подход, ведь создание модели – это творческий и осознанный процесс.

Свойство полноты математической модели состоит в том, что эта модель даёт принципиальную возможность с помощью математических методов получить все интересующие нас утверждения. Так, разобранный пример колебания груза на пружине полна, если нас интересует только частота колебаний. Если нас интересует ещё и амплитуда, то эта модель будет неполной.

Свойство продуктивности следует из доступности исходных данных – параметров и зависимостей, которые мы задаём априори. Если мы не можем реально измерить, и тем самым задать исходные данные, то решение задачи математического моделирования даст нам ответ на вопрос, какими свойствами могут обладать объекты рассматриваемого класса, но описание конкретного объекта может оказаться затруднительным.

Требование робастности означает устойчивость относительно погрешностей в исходных данных или в выборе оценочных шкал. Проверка на робастность может быть одним из важных компонентов верификации модели.

Наконец, желательным (хотя и необязательным) является **свойство наглядности** математической модели. Под этим подразумевается непосредственный содержательный смысл её компонентов, что позволяет в ряде случаев использовать эту информацию для более успешного решения модельного уравнения. Заметим, что для талантливого исследователя всякая хорошая модель является источником новых идей, а в ряде случаев и результатов, получение которых при разработке этой модели не планировалось.

Помимо требований, к математическим моделям применяется **принцип единства и множественности моделей**.

Вспомним рассмотренный нами в начале этого параграфа пример колебания груза на пружине. Требование простоты для данной модели, очевидно, выполнено – трудно представить себе модель ещё проще. Однако с адекватностью дело обстоит

существенно сложнее: из уравнения $m \frac{d^2 x}{dt^2} + kx = 0$ никак не следует способ вычисления амплитуды колебаний. Далее, в реальной системе колебания затухают (посторонняя вынуждающая сила отсутствует!), но из его решения, напротив, следует постоянство амплитуды. Допущены и другие упрощения (например, линейность реакции пружины). Если мы захотим учесть влияние (предположительно малых) противодействующих сил, то, приняв гипотезу вязкого трения (сила торможения пропорциональна скорости), получим следующее уравнение с малым коэффициентом трения f :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + f \frac{dx}{dt} + kx = 0.$$

Тем самым мы построили ещё одну модель рассматриваемого процесса – она более адекватная, но и более сложная, чем модель без трения, которая «вкладывается» в модель с затуханием при $f=0$. В принципе, существует бесчисленное множество математических моделей одного и того же реально-го объекта, причём далеко не все они вложены друг в друга.

Вместе с тем имеет место и обратная картина: различные реальные объекты или различные содержательные модели могут иметь одну и ту же математическую модель. Например, заряд $q = q(t)$ в замкнутом контуре, последовательно содержащем сопротивление R , индуктивность L и ёмкость C (такой контур обычно называют колебательным), удовлетворяет уравнению колебательного контура

$$L \frac{d^2 q}{dt^2} + R \frac{dq}{dt} + \frac{q}{C} = 0.$$

С математической точки зрения уравнение колебательного контура совпадает с уравнением затухающих колебаний с точностью до переобозначений. Придавая другой физический смысл входящим в эти два уравнения переменным и константам, мы получим общее модельное уравнение, описывающее всевозможные линейные осцилляторы. Поэтому вместо исследований колебаний сложной механической системы мы можем

провести измерения в соответствующим образом подобранной электрической цепи, имеющей такую же математическую модель. Итак, существует множество реальных объектов, описываемых одной и той же математической моделью.

Сформулированные в двух предыдущих абзацах основополагающие принципы иногда формулируются как *общий принцип множественности и единства моделей*.

1.4. Связь математического моделирования с ФГМ

Физико-геологическая модель объекта геофизического изучения – это система абстрактных возмущающих тел и вызываемых ими аномальных эффектов, которые описывают с некоторой точностью (аппроксимируют) геологический объект и с необходимой для моделирования детальностью обобщённо отражают его структуру, размеры, форму, петрофизические свойства и соответствующее им объёмное распределение физических полей.

Приведённое определение является общим, в одинаковой степени пригодным для аппроксимации любого геологического объекта, будь то блок земной коры, нефтегазоперспективная или любая иная геологическая структура, рудное поле, месторождение полезного ископаемого, отдельное рудное тело, комплекс либо разновидность горных пород, представляющие интерес при геологическом картировании.

Таким образом, *физико-геологическая модель* отражает взаимосвязи существенных свойств моделируемого геологического объекта с физическими полями, которые мы регистрируем или ожидаем увидеть в его окрестностях.

Основой для формирования ФГМ служит *петрофизическая модель (ПФМ)*, под которой понимают объёмное распределение в геологическом пространстве различных физических параметров, характеризующих главные *структурно-вещественные комплексы* изучаемого рудного поля, месторождения полезного ископаемого либо другого геологического объекта.

Под термином «*структурно-вещественный комплекс*» (*СВК*) понимают объединённую по одному или нескольким фи-

зическим свойствам совокупность геологических образований, наделённую соответствующими «эффективными» физическими характеристиками. Именно СВК является реальными объектами геофизического изучения. Из определения СВК следует их относительный характер, так как критерии объединения пород и руд в те или иные СВК существенно зависят от задач работ, условий залегания изучаемых объектов и разрешающей способности геофизических методов. Например, если объединяемые в какой-то СВК горные породы имеют неразличимые в статистическом смысле распределения физических характеристик, то они принципиально не могут быть разделены по данным соответствующих геофизических измерений и, следовательно, такие СВК характеризуют предельную разрешающую способность геофизического метода. В частном, благоприятном для разведочной геофизики случае поверхности, ограничивающие СВК, могут быть связаны с границами стратиграфических подразделений или с контактами смены пород разного литолого-петрографического состава. К сожалению, это бывает не всегда, и, как правило, число СВК в пределах конкретного рудного поля меньше, чем суммарное количество выделяемых групп горных пород и рудных генераций. Это тем более характерно для тех случаев, когда в качестве критерия для объединения пород в СВК используется разрешающая способность дистанционных геофизических методов.

Таким образом, *физико-геологическая модель* – это обобщённая ПФМ плюс полученные для неё любым способом (аналитическим, моделированием, в том числе натурным) физические поля. Последовательность физико-геологического моделирования в самом общем виде выглядит следующим образом: выделение структурно-вещественных комплексов в пределах исследуемого геологического пространства; построение петрофизической модели, создание самой ФГМ исследуемого геологического объекта в целом.

Связь ФГМ и математического моделирования очевидна. Ведь одним из этапов разведочной геофизики является интерпретация геофизических данных, полученных в поле. Имея

априорную ФГМ (параметры среды) мы можем рассчитать соответствующие поля и решить обратную задачу. Либо наоборот, решив обратную задачу геофизики, мы сможем построить ФГМ. В любом случае тяжело представить себе эти два направления моделирования без наличия связи между ними.

1.5. Виды ФГМ

В зависимости от способов формирования и описания параметров модели подразделяют на детерминированные и вероятностно-статистические.

Детерминированные получают путём расчёта ожидаемых аномальных эффектов с помощью уравнений математической физики при жёстко ограниченных, наперёд заданных значениях исходных петрофизических и морфологических параметров моделей. Этот подход традиционен. К сожалению, при всей фундаментальности и строгости он требует точного знания граничных условий и однородного распределения петрофизических свойств в пределах каждого СВК.

Вероятностно-статистические ФГМ в свою очередь подразделяются на статистические и стохастические (вероятностные). **Статистические ФГМ** носят ярко выраженный эмпирический (основанный на эксперименте) характер. При их построении широко используют приёмы анализа экспериментальных данных: статистическое оценивание и проверку гипотез, регрессионный и факторный анализы, способы фильтрации и распознавания и др. **Статистические модели** особенно эффективны для характеристики слабоконтрастных геологических объектов, незначительно отличающихся по средним значениям, дисперсиям или другим статистикам физических полей от вмещающих их пород.

Стохастические ФГМ формируют путём вероятностного описания моделируемых объектов. Решение прямых задач геофизики при этом также имеет вероятностную трактовку и заключается в расчёте математических ожиданий, дисперсии или корреляционных функций аномальных эффектов. Это позволяет охарактеризовать весь возможный диапазон изменения фи-

зических полей для бесконечного в общем случае, множества состояний модели объекта. В частности, такими моделями удобно аппроксимировать геологические тела сложного строения с неравномерным распределением физических свойств: жильные зоны, пачки рудных тел разного качества и т. п.

С точки зрения решаемых задач, используемых моделей и способов анализа данных в *вероятностно-статистическом подходе* наметилось два направления.

Первое направление базируется на модели экспериментального материала, учитывающей случайный характер помех, обусловленных неконтролируемыми флуктуациями параметров реальных источников и приёмников физических полей. Неоднородности зоны малых скоростей, неглубоко залегающие источники гравитационных и магнитных полей, гетерогенность излучающих и экранирующих радиоактивное излучение сред и другие неоднородности, не учитываемые моделью изучаемого объекта, также формируют случайное поле помех. В статистической теории интерпретации при выделении слабых аномалий на фоне помех и в количественных способах интерпретации помеху аппроксимируют некоторыми *моделями случайных процессов*. Характеристики последних (математические ожидания, дисперсии, автокорреляционные функции или спектральные плотности) могут быть заданы на основе теоретических соображений с учётом имеющейся априорной информации, определяться на эталонах или оцениваться совместно с параметрами модели изучаемого объекта [4].

Второе направление основывается на *стохастических моделях* объектов, характерная особенность которых – использование вероятностного описания случайных параметров самих моделей. Это направление предполагает установление, исследование и использование количественных зависимостей между вероятностным описанием источников и характеристиками генерируемых ими случайных физических полей. Способы *стохастического моделирования* являются эффективным инструментом для исследования влияния тех или иных параметров ФГМ на ожидаемые аномальные эффекты и помогают

устанавливать особенности проявления структуры сложных неоднородных объектов в физических полях.

Вероятностный подход к построению ФГМ природных геологических систем – достаточно общий, хотя и не всегда самый простой. В частности, стохастические модели на уровне математических ожиданий включают в себя детерминированные.

Учитывая широкое проявление принципа историзма в геологии, различают **статические и динамические ФГМ**. **Статические ФГМ** – это фиксированное состояние объекта в определённый момент времени (модель не изменяется со временем). **Динамические** отражают специфику сочетания геофизических полей и их числовых характеристик на разных стадиях (изменяется со временем) геологических или физических процессов. Успехи в области палеомагнетизма, изучения движения литосферных плит, геофизических предвестников землетрясений, широкое внедрение геофизического мониторинга окружающей среды, режимных наблюдений за многолетней мерзлотой, естественными фильтрационно-диффузионными и другими нестационарными электрическими полями, гидрогеохимическими параметрами подземных вод определяют насущную необходимость в развитии идеи, разработке методики формирования и использовании **динамических ФГМ**.

1.5.1. Детерминированные ФГМ

Понятие о детерминированных ФГМ по принципам, положенным в основу их формирования и математического описания, довольно тесно смыкается с традиционным представлением о возмущающем объекте, которое начиная с 20-х гг. текущего столетия широко применяют для решения прямых задач геофизики с целью расчёта ожидаемых аномалий и интерпретации геофизических данных способами подбора. Различие в этих понятиях заключается лишь в том, что возмущающий объект привлекают для моделирования какого-то одного физического поля, а ФГМ является общей и позволяет анализировать изучаемое геологическое тело одновременно с разных сторон, синтезировано обобщая его проявления в различных физических полях.

Особенностью детерминированных моделей является то, что для их построений используются средние либо экстремальные значения эффективных характеристик и геометрических параметров, а также жёсткие граничные условия, устанавливаемые для источников физических полей. Подобные допущения упрощают модель, поскольку физические свойства всех геологических образований, даже в самых благоприятных случаях, характеризуются значительной дисперсией, а размеры объектов рассчитываются как средние по многим частным реализациям. Однако именно эти условия определяют принципиальную возможность детерминированной аппроксимации реальных геологических структур, месторождений, рудных тел и широкого привлечения для этой цели хорошо разработанного аппарата уравнений математической физики для расчёта и интерпретации создаваемых ими геофизических полей.

Несомненными достоинствами детерминированных ФГМ являются традиционные способы их формирования, наглядность, относительная простота логико-математических конструкций, привычные приёмы анализа свойств моделей, а также возможность их использования в качестве первого приближения при создании стохастических ФГМ сложных геологических объектов. К недостаткам следует отнести ограниченный круг аппроксимируемых ими ситуаций и, как следствие, необходимость построения большого числа вариантов моделей.

1.5.2. Статистические (вероятностные) модели. Способы статистического анализа геофизической информации

Статистические модели и методы широко используются в геолого-геофизических приложениях и являются основой способов выделения слабых геофизических аномалий, приёмов комплексного анализа данных и решения обратных задач геофизики. Статистические модели получают в результате статистической обработки данных геолого-геофизического эксперимента, при этом в зависимости от задач и этапов исследований имеет смысл различать ***модели описательные и интерпретационные.***

К описательным относятся собственно статистические ФГМ, используемые при моделировании объектов сложного геологического строения в условиях, когда решение прямых задач затруднено или ненадёжно из-за отсутствия достаточного объёма информации о параметрах моделируемого объекта. В таких ситуациях по результатам геофизических работ на объектах, аналогичных моделируемым, формируются эталонные выборки, характеризующие распределения полей над самими объектами и вмещающими породами. Результаты статистической обработки, анализа одномерных и многомерных статистик и проверки статистических гипотез о различиях тех или иных свойств объекта и вмещающей среды образуют совокупность данных, являющихся основой для обоснования рациональной методики изучения объекта, а также проектирования графа обработки геофизической информации.

Интерпретационные статистические модели положены в основу алгоритмов обработки, анализа и интерпретации геофизических полей – это регрессионные модели, модели фильтрации и распознавания, количественной интерпретации данных. Особенностью этих моделей является их универсальность, так как они могут применяться к объектам, характеризующимся не только статистическими, но и детерминированными или стохастическими ФГМ. Например, детерминированная ФГМ, дополненная статистической моделью помехи, служит основой для выделения аномального эффекта искомого объекта способом обратных вероятностей.

Необходимо отметить, что разделение статистических моделей на описательные и интерпретационные не означает их противопоставления, так как первые являются результатом, а вторые – средством статистического анализа геофизической информации.

Статистическими описательными моделями, в частности, описываются участки сосредоточения редкометалльных и слюдоносных пегматитов, которые характеризуются сочетанием слабой дифференциации физических свойств пегматитов и вмещающих пород с небольшими размерами отдельных пегматитовых тел.

Интерпретационные статистические модели позволяют разработать ряд *способов статистического анализа геофизической информации*, которые предназначены для решения трёх основных задач: 1) прогноза некоторых характеристик объекта по результатам измерений косвенных геофизических признаков; 2) выделения слабых геофизических аномалий на фоне помех; 3) классификации объектов по комплексу геофизических признаков. Математическое обеспечение этих задач основывается соответственно на регрессионных моделях, моделях фильтрации и распознавания. Решение конкретных геологических задач обычно требует определённой адаптации статистических моделей, положенных в основу применяемых способов анализа информации, а также реализующих их алгоритмов.

1.5.3. Стохастические модели. Описание неоднородных геологических объектов. Интегральные характеристики стохастических моделей объектов. Модели полей для объектов со случайными параметрами

Эффективность вероятностно-статистического подхода при решении задач разведочной геофизики во многом определяется уровнем используемых при этом модельных представлений. Статистические методы ориентированы в основном на математические модели, характеризующие внешние признаки исследуемого объекта, что, в частности, типично для задач статистического оценивания, распознавания и аппроксимации. В значительно меньшей степени распространено использование стохастических (вероятностных) моделей, задающих описание внутреннего строения объекта исследования, хотя именно такие модели позволяют устанавливать особенности проявления его структуры во внешних признаках, например, в физических полях.

Стохастическое моделирование основывается на представлении о множестве, возможно, бесконечном, случайных состояний модели объекта. Такое множество может быть охарактеризовано относительно небольшим числом параметров вероятностных распределений случайных характеристик модели. Ве-

роятностное описание определяет высокую степень параметризации, а, следовательно, и устойчивость стохастических моделей. Построение таких моделей во многом опирается на информацию, получаемую при формировании детерминированных или статистических ФГМ. Потенциальная область применения стохастических моделей при планировании геофизических экспериментов в анализе данных достаточно обширна, так как во многих случаях они позволяют получать весьма строгие решения задач, формализация которых в рамках детерминированного подхода или эмпирической статистики крайне затруднена или вообще невозможна.

Ниже кратко приводятся некоторые примеры способов описания моделей неоднородных объектов для моделей со случайными параметрами.

Описание неоднородных геологических объектов

Существенной чертой реальных геологических тел является неоднородность их строения, которая в качественном отношении обычно отражается в описаниях структуры месторождений полезных ископаемых или в классификации пород и руд по их текстурно-структурным признакам. Естественно, что количественные оценки влияния неоднородности объекта на его свойства возможны только на основе построения его математической модели.

Многообразие возможных реализаций строения минерального вещества, обладающего одной и той же текстурно-структурной характеристикой, практическая невозможность задания огромного числа параметров для описания положения, геометрии и физических свойств каждой неоднородности определяют целесообразность привлечения стохастических моделей для описания сложных ситуаций. Основное преимущество таких моделей – относительно небольшое число параметров, достаточных для описания характеристик и особенностей неоднородных сред. Это свойство стохастических моделей принципиально, поскольку их параметры содержат вероятностную информацию обо всех возможных состояниях моделируемого

объекта. Большинство рассматриваемых моделей в той или иной степени идеализируют реальные объекты, но даже ограниченное число предлагаемых стохастических моделей удовлетворительно аппроксимирует достаточно большое число возможных ситуаций.

Примерами таких случаев могут служить модели случайных сред, объекты с неоднородным строением и др.

Представленное выше описание неоднородных геологических объектов и соответствующие стохастические модели определяют (в вероятностном смысле) физические свойства или содержания химических элементов в любой точке объекта. Во многих случаях такие «точечные» характеристики не соответствуют реальным условиям эксперимента, осуществляемого физическим устройством, всегда определяющим с той или иной разрешающей способностью эффективное (интегральное, суммарное) значение свойства для некоторой части объёма объекта. Аналогичные ситуации возникают и при вычислении обобщённых физических свойств структурно-вещественных комплексов, составляющих основу петрофизических моделей, при геохимическом и геологическом опробовании неоднородных сред. Чтобы устранить это несоответствие, вводятся **интегральные характеристики стохастических моделей объектов**.

Эффективность вероятностно-статистического подхода к обработке, анализу и интерпретации геофизических данных доказана работами С. В. Гольдина, Ф. М. Гольцмана, Т. Б. Калининой, А. А. Никитина и других исследователей. Его реализация привела к разработке статистической теории интерпретации геофизических данных, включающей приёмы выделения слабых геофизических аномалий, комплексного анализа и количественной интерпретации данных.

Связь между параметрами стохастических моделей объектов и создаваемыми ими аномальными эффектами устанавливается в результате решения прямых задач, сводящихся в данном случае к расчёту некоторых вероятностных характеристик случайных геофизических полей. В дальнейшем полученные обобщённые характеристики, например, математические ожидания, дисперсии или корреляционные функции могут быть ис-

пользованы для решения многих методических и интерпретационных задач. К числу последних относятся определения диапазона возможных вариаций аномальных эффектов априорных ФГМ, исследование разрешающей способности геофизических методов при изучении объектов сложного строения, оценка влияния условий регистрации физического поля на результаты геофизических измерений, определение параметров фильтров для обнаружения слабых геофизических аномалий и др.

1.5.4. Динамические ФГМ

Все рассмотренные ранее физико-геологические модели носят статический характер, поскольку они в традиционной для разведочной геофизики манере описывают не ход, а конечный итог геологических процессов и явлений. В то же время успехи и новые достижения, полученные геофизическими методами исследований в области глобальной тектоники, палеомагнетизма, изучения горного давления, предвестников землетрясений и решения многих других проблем, убедительно доказывают принципиальную возможность и практическую целесообразность более активного внедрения средств прикладной геофизики для изучения самих геологических процессов.

Для построения динамических ФГМ используют данные измерений физических параметров геологических образований, а также геофизический мониторинг. Тектонические, гидротермально-метасоматические и метаморфические процессы в земной коре сопровождаются изменениями упругих, физико-механических и других петрофизических свойств. Эти изменения не проходят бесследно, и изучение таких связей позволяет выявлять эволюцию палеотектонических и современных полей напряжений, петрофизические типы пород, благоприятные для рудообразования и т. п.

Чаще всего, динамические ФГМ формируют с прогнозными целями, они призваны отражать направленность, ход, глубину и степень развития процессов тектогенеза, рудообразования, гидротермально-метасоматических преобразований вмещающих пород, метаморфизма.

1.6. Виды математических моделей

Построение всех приведенных физико-геологических моделей трудно представить без участия математики: элементов математического моделирования. Поэтому легко понять, что все разобранные виды ФГМ тесно связаны с математическими моделями того же направления. Ещё раз пройдемся по уже известным моделям.

Детерминированные математические модели – это модели, в которых входные параметры поддаются измерению однозначно и с любой степенью точности, т. е. являются детерминированными (определёнными, заданными) величинами. Соответственно, процесс, описываемый такой моделью, детерминирован. В нашем случае ФГМ детерминированная.

Как мы выяснили, статистические ФГМ содержат параметры среды, которые задаются с некоторой степенью вероятности, причем эта степень вероятности определяется либо из априорной информации, либо из опыта (накопленной информации). Стохастические ФГМ описывают объект, так сказать, изнутри. Если мы хотим изучить влияние каких-то вероятностных особенностей строения объекта (зернистость, трещиноватость, пористость и т. д.), тогда необходимо использовать стохастические модели. С точки зрения математического моделирования эти два направления трудно разделить – в обоих случаях используются случайные величины и соответствующая *стохастическая (статистическая) математическая модель*.

Динамические математические модели в точности повторяют смысл ФГМ и описывают процесс (объект, явление и др.), который изменяется во времени. В *статических математических моделях* время не учитывается.

Стоит упомянуть *непрерывные и дискретные математические модели*, без которых трудно представить вычислительные методы, которые применяются для решения прямых и обратных задач геофизики. Такое деление происходит по типу используемых величин, которые принимают либо дискретные значения («оторванные» друг от друга значения, допускающие естественную нумерацию), либо непрерывные (принимающие

все значения из некоторого интервала). Между этими типами нет принципиального барьера и при уточнении или видоизменении модели дискретная картина может стать непрерывной (аппроксимация, интерполяция и т. д.) и обратно (дискретизация); то же может произойти в процессе решения математической задачи. Таким образом, во многих задачах при составлении математической модели, а также при выборе метода её исследования надо учитывать возможность применения как «дискретного», так и «непрерывного» аппаратов (например, для дискретных моделей характерно применение сумм, а для непрерывных – производных и интегралов) независимо от характера исходной картины.

Ещё одно важное направление, которое стоит выделить, *линейные (нелинейные) математические модели*. Так как у нас математическая модель – это в том числе уравнение, где по заданным параметрам вычисляются интересующие нас свойства (поля), то понятие линейности функции, известное из курса математического анализа, можно распространить на модель. Тогда модель называется линейной, если в ней выполнен принцип суперпозиции (наложения), то есть при сложении входов складываются и выходы, а при умножении входа на любое число выход умножается на то же число. Если этот принцип не выполнен, *модель называется нелинейной*.

Существует ещё множество классификаций и видов математических моделей.

Стоит понять, что как физико-геологические, так и математические модели чаще всего являются объектом для дальнейшего анализа: используются для дальнейшего применения в геологии, экономике, археологии и т. д. В геофизике же ФГМ связана с соответствующей математической моделью, которая используется для вычисления полей, чаще всего с помощью вычислительных методов, что в свою очередь позволяет решить важнейшую задачу геофизики – обратную задачу.

ГЛАВА 2

Численные методы

... в каждой отдельной естественной науке можно найти собственно науку лишь постольку, поскольку в ней можно найти математику.

Иммануил Кант

В современном мире математика является основным методом теоретического исследования и практическим орудием в естествознании и технике, без математики совершенно невозможно проводить серьёзные научные и инженерные расчёты. Математика, как наука, возникла в связи с необходимостью решения практических задач: измерений на местности, навигации и т. д. Вследствие этого математика всегда была **численной математикой**, её целью являлось получение решения задач в виде числа, а с появлением ЭВМ возникло понятие **«математическое моделирование»**.

Академик А. А. Самарский, которого многие считают основоположником отечественного математического моделирования, выразил методологию математического моделирования триадой «модель – алгоритм – программа»:

– На первом этапе (модель) выбирается или строится модель исследуемого объекта, которая в математической форме отражает его важнейшие свойства.

– На втором этапе (алгоритм) выбирается или разрабатывается вычислительный алгоритм для реализации построенной модели на компьютере.

– На третьем этапе создаётся программное обеспечение для реализации модели и алгоритма на компьютере.

Предложенная методология получила своё развитие в виде технологии **вычислительного эксперимента**.

Широкое применение ЭВМ в математическом моделировании, разработанная теория и значительные практические результаты позволяют говорить о **вычислительном эксперименте**, как о новой технологии и методологии научных и практических исследований. Роль вычислительного эксперимента труд-

но переоценить в современном мире науки и техники, особенно когда натурный эксперимент оказывается либо невозможен (например, при изучении здоровья человека), либо слишком опасен (например, при изучении экологических явлений), либо слишком дорог и сложен (например, при изучении астрофизических явлений).

Можно легко отметить достоинства вычислительного эксперимента по сравнению с натурным (физическим). Вычислительный эксперимент, как правило, дешевле физического. В этот эксперимент можно легко и безопасно вмешиваться. Его можно повторить ещё раз. В ходе этого эксперимента можно смоделировать условия, которые создать затруднительно или даже невозможно.

Вычислительный эксперимент в науке использовался издавна. Сначала решали задачи прикладной математики, связанные с вычислением площадей и объёмов, расчётами простейших механизмов, т. е. с несложными задачами арифметики, алгебры и геометрии. Вычислительными средствами служили собственные пальцы, а затем – счёты. Большинство вычислений выполнялось точно, без округлений. В XVII в. Исаак Ньютон полностью описал закономерности движения планет вокруг Солнца, решал задачи геодезии. Задачи сводились к обыкновенным дифференциальным уравнениям, либо к алгебраическим системам с большим числом неизвестных, вычисления проводились с достаточно высокой точностью. При вычислениях использовались таблицы элементарных функций, арифмометр, логарифмическая линейка; к концу этого периода появились неплохие клавишные машины с электромотором.

В это время были разработаны *алгоритмы численных методов*, которые до сих пор занимают почётное место в арсенале вычислительной математики. Так, Ньютон предложил эффективный *численный метод* решения алгебраических уравнений, а Эйлер – *численный метод* решения обыкновенных дифференциальных уравнений.

Численное решение прикладных задач всегда интересовало математиков. Разработкой *численных методов* занимались

крупнейшие учёные своего времени: Ньютон, Эйлер, Лобачевский, Гаусс, Эрмит, Чебышев и др. **Численные методы**, разработанные ими, носят их имена. Развитие **численных методов** способствовало постоянному расширению сферы применения математики в других научных дисциплинах и прикладных работах. Появление ЭВМ дало мощный импульс ещё более широкому внедрению численных методов в практику научных и технических расчётов. Скорость выполнения вычислительных операций выросла в миллионы раз, что позволило решить широкий круг математических задач, бывших до этого практически не решаемыми.

Разработка и исследование вычислительных алгоритмов, их применение к решению конкретных задач составляет содержание огромного раздела современной математики – **вычислительной математики**. В узком смысле **вычислительную математику** определяют, как теорию **численных методов и алгоритмов** решения поставленных математических задач.

Современные компьютерно-ориентированные численные методы должны удовлетворять многообразным и зачастую противоречивым требованиям. Обычно построение численного метода для заданной математической модели разбивается на два этапа: дискретизацию исходной математической задачи и разработку вычислительного алгоритма, позволяющего отыскать решение дискретной задачи. Соответственно выделяются 2 группы требований: адекватность дискретной модели и возможность реализации численного метода на имеющейся вычислительной технике.

К первой группе относятся такие требования, как **сходимость** и **корректность** численного метода. Численный метод сходится, если полученное численное решение приближается к истинному (или к предполагаемому, когда не знаем истинного). Исходя из этого, очень важно уметь оценивать погрешность метода, т. е. отличие истинного и численного решения. Для оценки **погрешности численных методов** в настоящее время разработано множество различных приёмов и методов – это целый раздел **вычислительных методов**.

Сходимость численного метода тесно связана с его корректностью. Численный метод называется корректным, аналогично корректно поставленной задаче в математике, когда он имеет решение, решение должно быть единственно и устойчиво по входным параметрам.

Вторая группа требований, предъявляемых к численным методам, связана с возможностью реализации данной дискретной модели на данном вычислительном устройстве, т. е. с возможностью получить численное решение за приемлемое время.

Обычно сложные вычислительные задачи, возникающие при исследовании физических и технических проблем, разбиваются на ряд элементарных. Многие элементарные задачи являются несложными, они хорошо изучены, для них уже разработаны численные методы, некоторые из которых мы разберём в данной главе [13].

2.1. Алгебраические и трансцендентные уравнения

Прежде чем перейти к методам решения, дадим основные определения.

Алгебраическое уравнение (полиномиальное уравнение) – уравнение вида $P(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = 0$, где P – многочлен от переменных $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ которые называются неизвестными. Например, $x^2 + y^2 = 5$ – это алгебраическое уравнение (полином) второго порядка.

Нам понадобится вспомогательное понятие *аналитической функции* (действительного переменного). *Однозначная и дифференцируемая в каждой точке области D функция называется аналитической.*

Трансцендентное уравнение – уравнение, не являющееся алгебраическим. Обычно это уравнения, содержащие показательные, логарифмические, тригонометрические, обратные тригонометрические функции, например

$$x = \cos x,$$

$$2^x = \lg x + x + 40,$$

$$x - 5 = \log_3 x.$$

Другими словами, *трансцендентное уравнение* – это уравнение вида $f(x) = g(x)$ где функции $f(x)$ и $g(x)$ являются аналитическими функциями, и по крайней мере одна из них не является алгебраической.

При решении таких алгебраических и трансцендентных уравнений зачастую встречаются такие, что невозможно отыскать точное решение. Поэтому необходимо применять приближённые численные методы для нахождения корней. Решение таких задач обычно разбивают на 2 этапа: *локализация корней* и *вычисление* с нужной точностью.

Локализация корня обычно проводится с использованием примерного графика функции, либо с помощью исследования знака функции. Разберём простой пример локализации с помощью графика. Для этого выберем следующее трансцендентное уравнение:

$$\cos x = \ln x.$$

Первый способ – это графическое представление всей заданной функции. Если мы ищем корни уравнения $\cos x = \ln x$ то мы должны перенести всё в одну сторону (обычно в левую) и получить классический вид уравнения: $\cos x - \ln x = 0$. Теперь мы можем построить график данной функции и определить интервал, на котором находятся корни (см. рис. 2.1а). Очевидно, что построение графика такой сложной функции нетривиальная задача, без какого-либо программного инструмента, например, Excel. Поэтому нужно использовать более простой, в данном случае, второй способ – это разбить на два уравнения: $y_1 = \cos x$; $y_2 = \ln x$. Графики этих функций всем известны из школьного курса и их можно построить от руки в приближённом виде (см. рис. 2.1б). На рис. 2.1 представлены оба случая, эллипсом показана область с корнем уравнения.

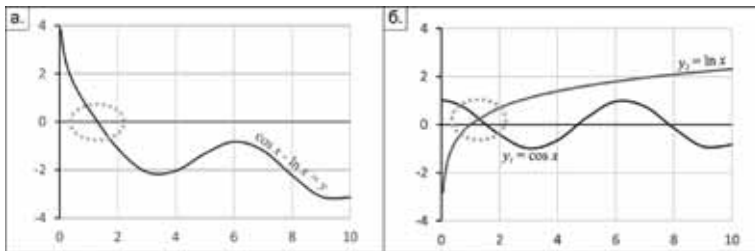


Рис. 2.1. Пример графической локализации корня трансцендентного уравнения

Понятно, что существует ещё и не графический способ локализации корней, который основан на **теореме о промежуточном значении** и следствии из неё.

Теорема о промежуточном значении (теорема Больцано – Коши)

Если непрерывная функция, определённая на вещественном интервале, принимает два значения, то она принимает и любое значение между ними. Или, что то же самое,

$$\text{если } f \in C([a, b]) \text{ и } f(a) = A < B = f(b), \\ \text{то } \forall C \in C[A, B] \exists c \in [a, b] : f(c) = C.$$

Теорема о нуле непрерывной функции (следствие из теоремы о промежуточном значении)

Если функция непрерывна на некотором отрезке и на концах этого отрезка принимает значения противоположных знаков, то существует точка, в которой она равна нулю. Или, что то же самое,

$$\text{если } f \in C([a, b]) \text{ и } \text{sing}(f(a)) \neq \text{sing}(f(b)), \text{ то } \exists c \in [a, b] : f(c) = 0.$$

Но представленное условие не гарантирует единственность корня, что хорошо иллюстрирует рис. 2.2. Поэтому нужно дополнительное условие – требование монотонности функ-

ции на этом отрезке. В качестве признака монотонности функции можно воспользоваться условием знакопостоянства первой производной $f'(x)$.

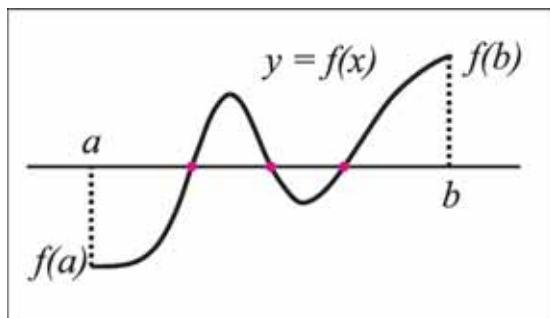


Рис. 2.2. Немонотонная на отрезке функция

В нашем курсе мы будем считать, что уравнение $f(x) = 0$ задано на отрезке $[a, b]$ и на этом отрезке расположен только один корень, который нам и требуется найти с определённой точностью. Существует несколько методов решений этой задачи и простейший – это метод бисекций или метод деления отрезка пополам.

2.1.1. Метод бисекций или метод деления отрезка пополам

Метод бисекций или метод деления отрезка пополам (половинного деления), как и большинство методов, которые мы будем рассматривать в данной главе, это **итерационный метод**. Суть таких методов заключается в нахождении по известному приближению (приближённому значению) искомой величины следующего, более точного приближения, т. е. каждый последующий шаг процесса нахождения корня зависит от предыдущего. И этот цикл повторяется до тех пор, пока не будет выполнено некоторое условие выхода из цикла. В нашем случае – это достижение заданной точности.

Как уже говорилось, будем считать, что уравнение $f(x) = 0$ задано на отрезке $[a, b]$ функция монотонна и на этом отрезке

расположен только один корень, который нам и требуется найти с определённой точностью ε (см. рис. 2.3). Для начала найдём значение функции в середине отрезка $x_2 = \frac{b+a}{2} = \frac{x_1+x_0}{2}$ при этом обозначим $x_0 = a$, $x_1 = b$. Затем исследуем значение функции на концах отрезков $[a = x_0, x_2]$ и $[x_2, b = x_1]$. Выбираем тот отрезок, на концах которого функция имеет разный знак, потому что по **теореме о нуле непрерывной функции**, если функция непрерывна на некотором отрезке и на концах этого отрезка принимает значения противоположных знаков, то существует точка, в которой она равна нулю. На рис. 2.3 представлена иллюстрация данного метода, где слева направо можно проследить последовательность приближений (итераций) для графика заданной функции. В нашем примере получается, что разные знаки у графика на отрезке $[x_0, x_2]$ (см. рис. 2.3а). Таким образом мы сузили отрезок в два раза. Продельываем ту же операцию и находим середину нового, выбранного нами, отрезка $x_3 = \frac{x_2+x_0}{2}$ (см. рис. 2.3б). Здесь уже разные знаки у функции на концах отрезка $[x_3, x_2]$. Теперь нам предстоит разбить отрезок $[x_3, x_2]$ пополам и найти x_4 (см. рис. 2.3в). Продолжая по представленному алгоритму, можно найти корень уравнения с заданной точностью (см. рис. 2.3г).

Причём точность вычисления, как в этом методе, так и во всех последующих, может задаваться одним из двух способов: либо значение функции должно достигнуть определённого сходства с нулём $f(x_n) < \varepsilon$, либо аргументы двух последних итераций должны сблизиться до заданной точности $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$.

К достоинствам метода деления пополам следует отнести его высокую надёжность и простоту.

Недостатком метода является тот факт, что прежде чем начать его применение, необходимо найти две точки, значения функции в которых имеют разные знаки. Метод неприменим для корней чётной кратности.

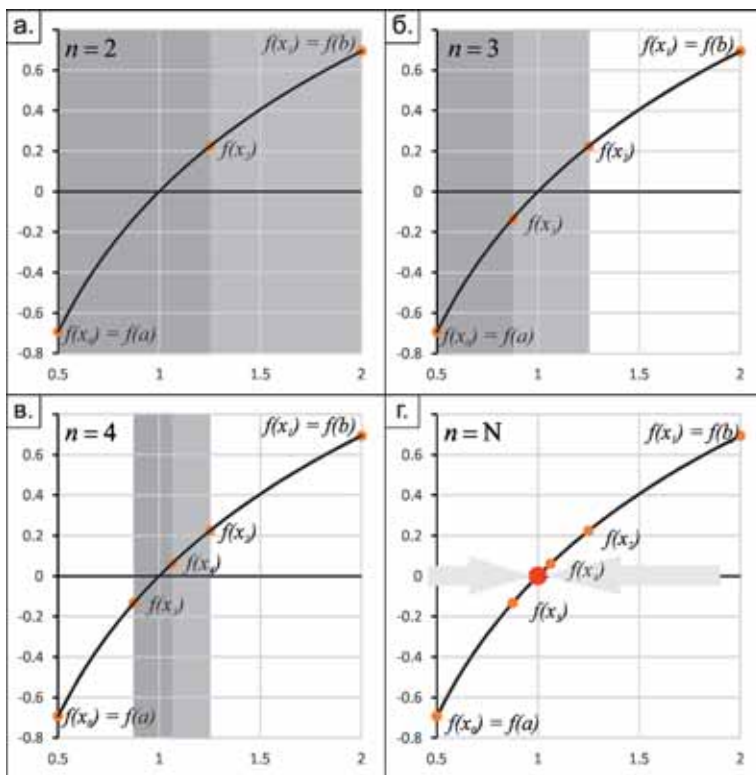


Рис. 2.3. Иллюстрация алгоритма метода бисекций (половинного деления)

2.1.2. Метод хорд, метод секущих

Метод хорд

Как и в прошлом методе, считаем, что уравнение $f(x) = 0$ задано на отрезке $[x_0 = a, b = x_1]$, функция монотонная и на этом отрезке расположен только один корень, который нам и требуется найти с определённой точностью ε (см. рис. 2.4). Первое приближение, в отличие от метода половинного деления, берём не в середине отрезка, а в точке x_2 , где пересекает ось абсцисс

хорда (прямая линия), проведённая через имеющиеся точки начала и конца отрезка. Координаты этих точек $(x_0, f(x_0))$ и $(x_1, f(x_1))$ (см. рис. 2.4). Запишем уравнение прямой, проходящей через эти точки, уравнение хорды

$$\frac{y - f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \Rightarrow (x = x_2, y = 0) \Rightarrow x_2 = x_0 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot f(x_0).$$

Получили выражение для точки пересечения прямой с осью абсцисс $(x = x_2, y = 0)$. Теперь мы знаем точку $(x_2, f(x_2))$. Проведя те же операции с точками $(x_0, f(x_0))$ и $(x_2, f(x_2))$, можно получить выражение для точки $(x_3, f(x_3))$

$$\frac{y - f(x_0)}{f(x_2) - f(x_0)} = \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \Rightarrow (x = x_3, y = 0) \Rightarrow x_3 = x_0 - \frac{x_2 - x_0}{f(x_2) - f(x_0)} \cdot f(x_0).$$

Процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность ε . Таким образом, получаем формулу для метода хорд

$$x_{n+1} = x_0 - \frac{x_n - x_0}{f(x_n) - f(x_0)} \cdot f(x_0).$$

Мы разобрали случай, представленный на рис. 2.4а, б, где неподвижной остаётся левая точка отрезка $[a, b]$. В случае (а) у нас будет возрастающая последовательность $f(x_n)$, а в случае (б) – убывающая последовательность, но обе они сходятся к корню нашего уравнения $f(x) = 0$.

Аналогично можно разобрать случаи с неподвижной правой точкой отрезка (см. рис. 2.4 в, г). Формула метода хорд останется неизменной, однако нужно будет поменять местами первые два приближения: $[x_1 = a, b = x_0]$.

Разобранные случаи показывают неоднозначность выбора неподвижной точки в методе хорд. Поэтому нужно использовать вторую производную нашей функции $f''(x)$ для определения фиксированного конца хорд. Чаще всего неподвижен тот конец, для которого знак функции $f(x)$ совпадает со знаком её второй производной $f''(x)$ как это проиллюстрировано на рис. 2.4. Выполнение этого условия позволяет ускорить скорость сходимости метода.

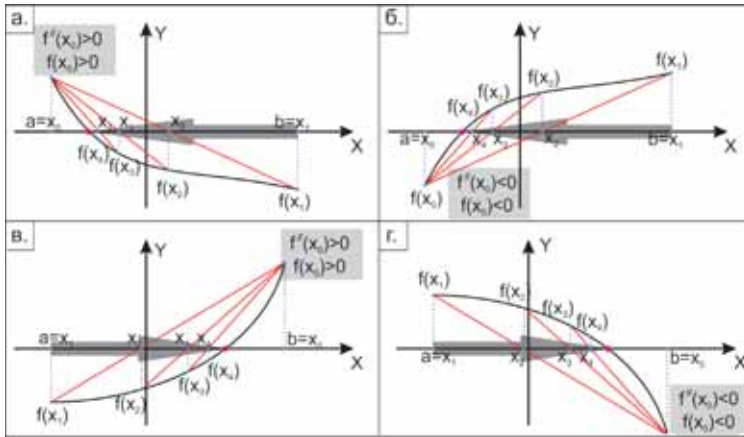


Рис. 2.4. Иллюстрация алгоритма метода хорд

Метод хорд и метод половинного деления схожи тем, что для каждого необходимо условие разных знаков функции на концах отрезка. Однако для следующего метода такое требование не обязательно.

Метод секущих

Для метода секущих существует несколько способов вывода итерационной формулы. В частности, его называют модифицированным методом Ньютона, где используется для вывода приближённое выражение первой производной. Однако мы ограничимся выводом, основанном на знании уравнения прямой (как и в методе хорд), которую необходимо провести через две известные точки.

Основное отличие от первых двух методов – не требуется задания отрезка, на котором функция определена и на концах имеет разные знаки. Здесь необходимо лишь две точки, в которых задана функция: $(x_0, f(x_0))$ и $(x_1, f(x_1))$. Через эти 2 точки, как и в методе хорд, можно провести прямую-секущую, уравнение которой будет иметь такой вид

$$\frac{y - f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \Rightarrow (x = x_2, y = 0) \Rightarrow x_2 = x_0 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot f(x_0).$$

Находим точку пересечения секущей с осью OX. Теперь мы не фиксируем один из концов, а проводим следующую секущую через две последние точки: $(x_1, f(x_1))$ и $(x_2, f(x_2))$. Тогда для третьей точки получим выражение

$$\frac{y - f(x_1)}{f(x_2) - f(x_1)} = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \Rightarrow (x = x_3, y = 0) \Rightarrow x_3 = x_1 - \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)} \cdot f(x_1).$$

Получаем формулу для итерационного процесса метода секущих

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \cdot f(x_n) = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \cdot f(x_n).$$

В результате получаем двухшаговый итерационный метод, то есть каждая следующая итерация x_{n+1} определяется двумя предыдущими x_n и x_{n-1} . Процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность ε (см. рис. 2.5). На рис. 2.5 приведена иллюстрация полученного алгоритма. Видно, что вне зависимости от того, имеет ли функция разный знак (см. рис. 2.5а) или одинаковый (см. рис. 2.5б), всё равно алгоритм позволяет находить решение.

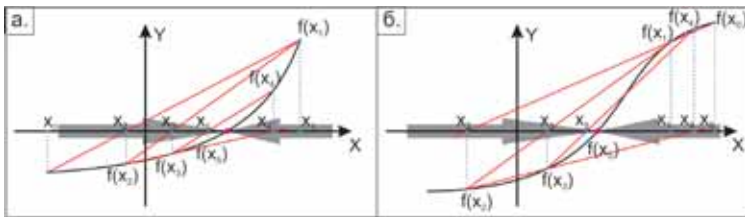


Рис. 2.5. Иллюстрация алгоритма метода секущих

Все три разобранные метода имеют существенное преимущество – для нахождения корня не требуется знать и вычислять никаких величин и значений, кроме значения нашей известной функции в точках. Но это влечёт за собой существенный недо-

статок – эти методы сходятся медленно или не сходятся вовсе. Следующий метод позволяет находить решения заданного уравнения $f(x) = 0$ быстрее (сходимость метода улучшается), но здесь уже потребуется вычисление производной функции $f'(x)$.

2.1.3. Метод Ньютона (метод касательных)

В методе Ньютона, в отличие от разобранных выше методов, нужна лишь одна начальная точка. Будем считать, что у нас эта точка задана и обозначим её x_0 . Проведём через данную точку касательную к кривой, которая описывает наша функция $f(x) = y$ (см. рис. 2.6). Если вспомнить геометрический смысл производной (производная в точке равна угловому коэффициенту касательной к графику функции в этой точке), то можно записать

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} = f'(x_0) \Rightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Здесь мы обозначили за x_1 пересечение касательной с осью абсцисс (см. рис. 2.6а). Её мы и будем рассматривать в качестве следующего приближения. Аналогично могут быть найдены и остальные приближения (на рис. 2.6б проиллюстрирован итерационный процесс метода). Тогда общая формула будет иметь следующий вид:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность ε . Но стоит отметить, что присутствие производной накладывает некоторые условия на функцию. Она должна быть дифференцируема, и её производная не должна менять знак в некоторой окрестности корня, иначе метод может не сойтись к искомому решению.

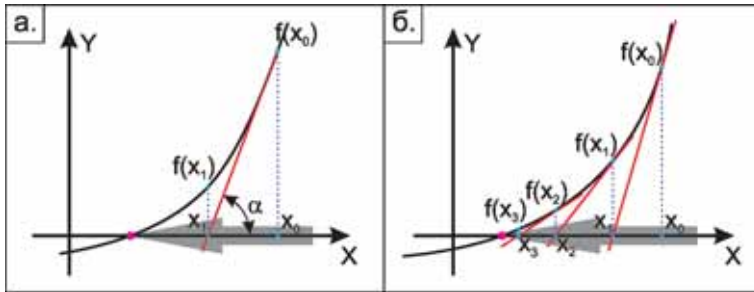


Рис. 2.6. Иллюстрация алгоритма метода Ньютона (метода касательных)

Теперь, возвращаясь к методу секущих, можно понять, почему его второе название – модифицированный метод Ньютона. Если применить определение производной, то можно записать

$$f'(x_n) = \frac{\Delta f(x_n)}{\Delta x_n} = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

Тогда из метода Ньютона мы получим формулу метода секущих

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \cdot f(x_n).$$

2.1.4. Метод простых итераций

Метод простой итерации – один из простейших численных методов решения уравнений. Тем не менее он же является более общим, по отношению к уже рассмотренным. Идея метода заключается в том, чтобы исходное уравнение $f(x) = 0$ привести к эквивалентному уравнению $x = \varphi(x)$. Это преобразование можно выполнить различными способами, которым посвящают отдельные разделы. Но в любом случае, после преобразования мы подставляем заданное начальное приближение x_0 в правую часть этого выражения и получаем следующее приближение в

левой части $x_1 = \varphi(x_0)$. Затем аналогичным образом получим $x_2 = \varphi(x_1)$. Тогда расчётная формула для этого метода будет выглядеть следующим образом:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n).$$

Такой итерационный метод, при определённых условиях накладываемых на функцию $\varphi(x)$, сходится к корню уравнения $f(x) = 0$. Но более общий метод предполагает соответствующие более общие условия сходимости, которые формулируются в виде теоремы, которая в данном пособии приводится без доказательства.

Теорема о сходимости метода простой итерации

Пусть в некоторой σ -окрестности корня уравнения $f(x) = 0$ функция $\varphi(x)$ дифференцируема и удовлетворяет неравенству $|\varphi'(x)| \leq q$, где $0 < q < 1$ – постоянная. Тогда независимо от выбора начального приближения из указанной σ -окрестности итерационная последовательность не выходит из этой окрестности, метод сходится.

При этом стоит учитывать, что и критерий окончания итерационного процесса может быть использован в привычном виде $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$ только в том случае, если $0 < q < 0,5$. В противном случае вычисления стоит вести до тех пор, пока не окажется выполнено условие $|x_n - x_{n-1}| < \frac{1-q}{q} \varepsilon$.

Теперь рассмотрим иллюстрации сходимости и расходимости данного метода, которые представлены на рис. 2.7. При решении уравнения $x = \varphi(x)$ необходимо отыскать точку пересечения прямой $y = x$ и кривой $y = \varphi(x)$, которая может представлять собой любую функцию. Для начала мы рассмотрим случай, когда итерационный процесс сходится. По **теореме о сходимости метода простой итерации** производная $|\varphi'(x)| \leq q$ где $0 < q < 1$. Другими словами, угол наклона не должен превышать 45° ($|\operatorname{tg} \alpha| \leq q$). Случай, когда производная меньше 1 и положительная, изображён на рис. 2.7а. Выбирается начальное приближение x_0 . Следующее приближение x_1 по

формуле метода простых итераций $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ будет равно $x_1 = \varphi(x_0)$. Чтобы отобразить это графически, проведём через точку $(x_0, \varphi(x_0))$ прямую, параллельную оси OX , до пересечения с прямой $y = x$. Полученная первая координата точки и будет искомым приближением x_1 . Опустив перпендикуляр на ось OX из заданной точки, найдём её положение. Аналогично можно получить все последующие приближения. Ещё раз вспомним, что такая картина получается, когда производная положительна и меньше 1 ($0 < |\varphi'(x)| < 1$) в некоторой окрестности искомого решения уравнения. Другими словами, когда угол наклона касательной изменяется от 0 до 45° .

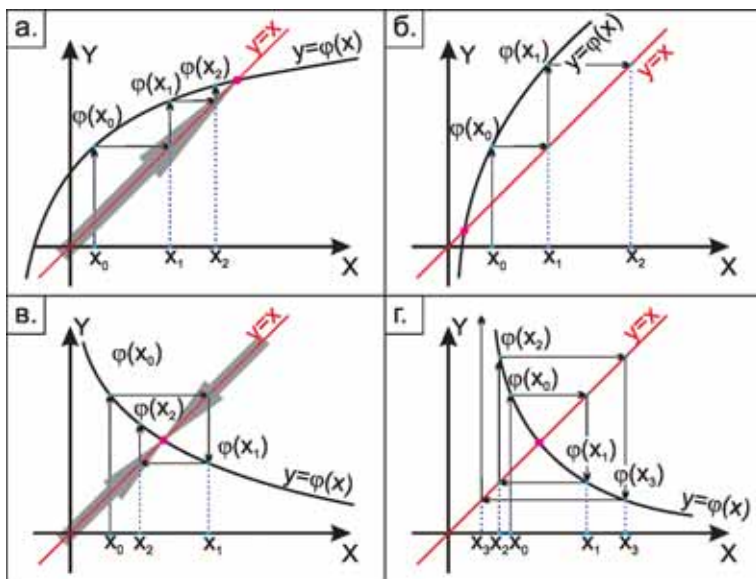


Рис. 2.7. Иллюстрация алгоритма метода простых итераций

Теперь рассмотрим следующий случай, когда производная отрицательна, но больше -1 в некоторой окрестности решения исходного уравнения ($-1 < \varphi'(x) < 0$). Угол наклона касательной в этом случае будет меняться от -45 до 0° . Этот случай представлен на рис. 2.7в. Последовательность приближений сходит-

ся к искомому корню, но каждое следующее приближение находится с другой стороны от предыдущего относительно решения. В прошлом случае все приближения находились с одной стороны от корня.

Оставшиеся 2 случая, когда производная больше 1 и меньше -1 , т. е. $|\varphi'(x)| > 1$ приведены на рис. 2.7б, г. Видно, что в этих случаях каждая следующая итерация даёт результат, который удаляет нас от искомого решения всё дальше.

Возвращаясь к преобразованию уравнения к итерационному виду, рассмотрим один из общих алгоритмов перехода от уравнения $f(x) = 0$ к уравнению $x = \varphi(x)$. Умножим левую и правую часть исходного уравнения на произвольную константу $\tau \neq 0$ и добавим к обеим частям x . При таком преобразовании корни исходного уравнения не поменяются

$$f(x) = 0 \Rightarrow \tau \cdot f(x) = \tau \cdot 0 \Rightarrow x + \tau \cdot f(x) = x + \tau \cdot 0.$$

В итоге получаем

$$x = x + \tau \cdot f(x).$$

Здесь $\varphi(x) = x + \tau \cdot f(x)$. Произвольный выбор константы τ позволяет выбрать её таким образом, чтобы выполнялось условие сходимости $|\varphi'(x)| \leq 1$. В данном случае $\varphi'(x) = 1 + \tau \cdot f'(x)$. Поэтому для выполнения условия сходимости нам остаётся решить неравенство

$$|\varphi'(x)| \leq |1 + \tau \cdot f'(x)| < 1.$$

Особо нужно отметить случай, когда $\varphi'(x) = 0$. При таком условии метод простых итераций будет иметь наибольшую скорость сходимости. Этого можно добиться, если параметр τ выбрать в качестве функции от переменной x

$$\varphi'(x) = 0 \Rightarrow 1 + \tau \cdot f'(x) = 0 \Rightarrow \tau(x) = \frac{-1}{f'(x)}.$$

Тогда итерационная формула простых итераций переходит в известную нам формулу метода Ньютона (метода касательных)

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Таким образом, метод Ньютона – это частный случай метода простых итераций с максимальной скоростью сходимости.

Задачи для самостоятельного решения

Определить местоположение хотя бы одного из корней уравнения с помощью разделения исходного выражения на функции с известным видом графиков. Проверить себя в Excel, построив исходную функцию и отдельные (воспользоваться шаблоном Ex1.xlsx, лист BiSection).

1. $x^3 - x + 1 = 0$.
2. $x^3 - x^2 - 9x + 9 = 0$.
3. $9 - x^2 - e^x = 0$.
4. $\sin 2x - x^2 + 6 = 0$.
5. $\frac{1}{1+x^2} - 0,1x^4 = 0$.
6. $\ln(1+x) - 0,4x^3 = 0$.

Методом бисекций проделать 4 итерации для уравнений 1–6, заранее проведя локализацию.

Методом бисекций найти корень с точностью 0,001 на заданном отрезке. Здесь и дальше точность определять с помощью формулы $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$. Воспользоваться шаблоном в Excel (Ex1.xlsx, лист BiSection). Построить графики и нанести итерации.

7. $x^4 + 2x^3 - x - 1 = 0$ отрезок $[0, 1]$.
8. $x^2 - e^x = 0$ отрезок $[0,5, 1]$.
9. $\sqrt{x} + x^2 - 10 = 0$ отрезок $[2, 3]$.
10. $x \sin x = 0$, отрезок $[2,5, 4]$.
11. $\cos x - \ln x = 0$ отрезок $[0, 2]$.
12. $x \lg x = 1$ отрезок $[2, 3]$.

Методом хорд найти корень с точностью 0,001 на заданном отрезке для примеров 7–12. Сравнить количество итераций в методе хорд и методе бисекций для соответствующих примеров. Построить график с точками и хордами. Воспользоваться шаблоном Excel (Ex1.xlsx, лист Chords).

Методом секущих найти корень с точностью 0,001 на заданном отрезке для примеров 7–12. Сравнить количество итераций, требуемое для достижения заданной точности в трёх методах: бисекций, хорд и секущих. Построить график с точками и секущими. Воспользоваться шаблоном Excel (Ex1.xlsx, лист Sekants).

На одном из примеров 7–12 убедиться в сходимости метода секущих при расположении начальных приближений по одну сторону от искомого решения.

Для уравнений 13–16 найти решение методом секущих с точностью 0,001, причём начальные точки нужно выбрать по одну сторону от корня уравнения.

13. $x \cos x = 1$.

14. $(x - 1)^2 - e^x = 0$.

15. $\sqrt{(x - 1)^2} - x = 0$.

16. $x - \cos x = 0$.

Методом Ньютона найти решение уравнений 17–21 с точностью 0,0001, если оно существует. Построить график с точками. Воспользоваться шаблоном Excel (Ex1.xlsx, лист Nuton).

17. $\sqrt{x} + x^2 - 10 = 0$.

18. $\lg x - \frac{7}{2x + 6} = 0$.

19. $\operatorname{tg} 2x = x^2$.

20. $2^x(x - 1)^2 = 2$.

21. $\cos(x + 3) = x^2$.

Из уравнений 1–21 выбрать такое, которое удовлетворяет условию сходимости метода простых итераций и найти решение с точностью 0,0001. Построить график с точками. Воспользоваться шаблоном Excel (Ex1.xlsx, лист Nuton).

2.2. Системы линейных алгебраических уравнений

Алгоритмы построения решения многих задач приводят нас к вычислительным задачам линейной алгебры. Так происходит при построении интерполяционных многочленов, при численном решении дифференциальных и интегральных уравнений, и в ряде других случаев. Поэтому очень важно уметь хорошо решать вычислительные задачи линейной алгебры.

К вычислительным задачам линейной алгебры относят задачи решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $Ax = b$, вычисления обратных матриц A^{-1} , вычисления определителей A , задачи вычисления собственных чисел и собственных векторов матриц. Эти задачи имеют очень важное теоретическое и прикладное значение. Трудности решения указанных задач, как правило, связаны с большой размерностью матриц.

Чаще всего вычислительные задачи линейной алгебры решают точными и итерационными методами. Метод называется **точным**, если решение можно получить за конечное число последовательных шагов (алгоритма-метода). Метод называется **итерационным**, если решение получается в виде предела элементов некоторой последовательности. Суть метода, как и в решении уравнений, заключается в нахождении по известному приближению (приближённому значению) искомой величины следующего, более точного приближения, т. е. каждый последующий шаг процесса нахождения корня зависит от предыдущего. И этот цикл повторяется до тех пор, пока не будет выполнено некоторое условие выхода из цикла (достигнута точность).

В точных методах пользуются известными формулами для определителей (метод Крамера) или матрицу исходной систе-

Если $\Delta \neq 0$, тогда система имеет единственное решение. Такую систему называют совместной и определённой. Если $\Delta = 0$ то система может иметь бесконечное множество решений (совместная, но неопределённая) или совсем не иметь решение (несовместная). Эти три случая можно проиллюстрировать на системе с размерностью 3×3 . В этом случае у нас три неизвестные (переменные), а значит, каждое из уравнений задаёт плоскость, и все искомые решения находятся в трёхмерном пространстве. На рис. 2.8а представлены три плоскости, которые пересекаются в одной точке – это случай $\Delta \neq 0$, когда система имеет единственное решение. Если результатом пересечения трёх плоскостей является прямая (см. рис. 2.8б), то это второй случай – система совместна, но неопределённая. Стоит заметить, что в этом случае коэффициенты при неизвестных и свободные члены пропорциональны. В третьем случае (см. рис. 2.8в) имеем три параллельные плоскости, т. е. система не имеет решений.

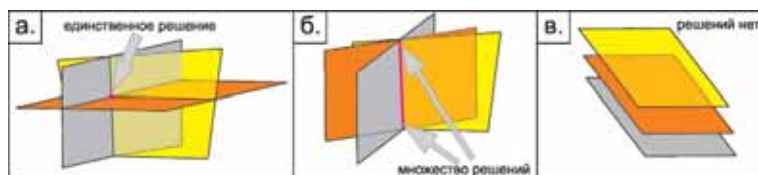


Рис. 2.8. Иллюстрация трёх случаев, возможных при решении систем СЛАУ размерностью 3×3 : а – совместная определённая; б – совместная, но неопределённая; в – несовместная

Теперь можно перейти к методу Крамера, который основан на использовании определителей в решении систем линейных уравнений.

Теорема Крамера

Если определитель системы отличен от нуля ($\Delta \neq 0$), то система линейных уравнений имеет одно единственное решение, причём неизвестное равно отношению определителей. В знаменателе – определитель системы Δ , а в числителе – опре-

делитель Δ_{x_i} , полученный из определителя системы путём замены коэффициентов при этом неизвестном x_i свободными членами.

Разберём более подробно, о чём идет речь. Пусть дана система

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}.$$

На основании теоремы Крамера можно записать:

$$x_1 = \frac{\Delta_{x_1}}{\Delta}, x_2 = \frac{\Delta_{x_2}}{\Delta}, \dots, x_n = \frac{\Delta_{x_n}}{\Delta}.$$

Эти выражения называются **формулами Крамера**.

Здесь Δ – это определитель системы

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Остальные определители получим, заменяя столбец с коэффициентами соответствующей переменной (неизвестного) свободными членами

$$\Delta_{x_1} = \begin{vmatrix} b_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ b_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{n-11} & a_{n-12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1n} \\ b_{n1} & a_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{nn} \end{vmatrix}, \quad \Delta_{x_2} = \begin{vmatrix} a_{11} & b_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & b_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n-11} & b_{n-12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1n} \\ a_{n1} & b_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{nn} \end{vmatrix};$$

$$\dots \Delta_{x_n} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & b_{nn} \end{vmatrix}.$$

Этот метод имеет место для системы линейных уравнений любого порядка, но так как вычисление определителя матрицы больших размеров затратная процедура, то чаще всего это делают для систем небольшой размерности. Удобно использовать этот подход и в случае необходимости найти лишь некоторые неизвестные.

Пример. Решить СЛАУ методом Крамера.

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + x_3 = 1 \\ 3x_1 - x_2 + 2x_3 = 1 \\ x_1 + 4x_2 - x_3 = 2 \end{cases} \Rightarrow \Delta = \begin{vmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 2 \\ 1 & 4 & -1 \end{vmatrix} = 14 \neq 0;$$

$$\Delta_{x_1} = \begin{vmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \\ 2 & 4 & -1 \end{vmatrix} = 14; \Delta_{x_2} = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{vmatrix} = 0; \Delta_{x_3} = \begin{vmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 1 \\ 1 & 4 & 2 \end{vmatrix} = -14.$$

Теперь по формулам Крамера можно найти неизвестные

$$x_1 = \frac{14}{14} = 1; \quad x_2 = \frac{0}{14}; \quad x_3 = \frac{-14}{14} = -1.$$

Ещё один способ – через обратную матрицу (решение матричного уравнения). Он также основан на нахождении определителей.

Если нашу СЛАУ $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ помножить справа и слева на обратную матрицу $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ то неизвестные (переменные) находятся с помощью перемножения обратной матрицы на столбец свободных членов $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{E}$, где \mathbf{E} – единичная матрица). Теперь нам нужно найти обратную матрицу \mathbf{A}^{-1} . Об-

ратную матрицу можно найти по формуле $\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \mathbf{A}_*^T$, где \mathbf{A}_*^T – транспонированная матрица алгебраических дополнений соответствующих элементов матрицы \mathbf{A} .

Алгебраическим дополнением элемента a_{ij} матрицы \mathbf{A} называется число $A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$, где M_{ij} – дополнительный минор, определитель матрицы, получающийся из исходной матрицы \mathbf{A} путём вычитания i -й строки и j -го столбца.

Методы, которые используют определители матриц, достаточно затратные (требуют много вычислений). Поэтому разрабатываются и совершенствуются другие методы решения СЛАУ. Одним из старейших методов считается метод Гаусса, но это не мешает ему до сих пор быть наиболее мощным и универсальным инструментом для нахождения решения **любой** системы линейных уравнений (метод Крамера и матричный метод не работают, когда $\det \mathbf{A} = 0$).

2.2.2. Метод Гаусса

Метод Гаусса состоит в том, что при помощи элементарных преобразований систему линейных уравнений приводят к такому виду, чтобы её матрица из коэффициентов оказалась треугольной (или трапециевидной). Другими словами, мы последовательно будем исключать неизвестные в нашей системе. По этой причине метод Гаусса часто называют методом последовательного исключения неизвестных.

Элементарными преобразованиями матриц называют:

- перестановку местами любых двух строк матрицы;
- умножение любой строки матрицы на константу;
- прибавление к любой строке матрицы другой строки.

Используя эти преобразования, всегда можно привести матрицу системы к треугольной (трапециевидной) форме. Такое преобразование матрицы называется прямым ходом метода Гаусса. Ниже в скалярной и матричной форме проиллюстрирован этот этап метода

ца будет иметь трапецевидную форму, т. к. она дополнена столбцом свободных членов). Ниже приведён пошагово прямой ход Гаусса

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & -1 & 2 \end{array} \right) \xrightarrow[\text{меняем}]{I, III \text{ строки}} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{I \cdot (-3) + II} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & -13 & 5 & -5 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{I \cdot (-2) + III} \\ & \xrightarrow{I \cdot (-2) + III} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & -13 & 5 & -5 \\ 0 & -5 & 3 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{II \cdot \left(\frac{5}{13}\right) + III} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -1 & 2 \\ 0 & -13 & 5 & -5 \\ 0 & 0 & \frac{14}{13} & -\frac{14}{13} \end{array} \right). \end{aligned}$$

Для наглядности возвратимся к скалярной записи СЛАУ

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 - x_3 = 2 & x_1 = 1; \\ -13x_2 + 5x_3 = -5 & \Rightarrow x_2 = 0; \\ \frac{14}{13}x_3 = -\frac{14}{13} & x_3 = -1. \end{cases}$$

Решение совпало с полученным методом Крамера набором неизвестных.

Как уже говорилось, в отличие от методов, которые используют определитель матрицы, метод Гаусса пригоден для решения любой СЛАУ. Ниже разберём пример с неединственным решением.

Сразу запишем расширенную матрицу

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 1 & 7 \\ 1 & 5 & 4 & 3 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \end{array} \right) \xrightarrow[\text{меняем}]{I, II \text{ строки}} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 5 & 4 & 3 \\ 3 & 2 & 1 & 7 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \end{array} \right) \xrightarrow{I \cdot (-3) + II, I \cdot (-2) + III} \\ & \xrightarrow{I \cdot (-3) + II, I \cdot (-2) + III} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 5 & 4 & 3 \\ 0 & -13 & -11 & -2 \\ 0 & -13 & -11 & -2 \end{array} \right) \xrightarrow{III - II} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 5 & 4 & 3 \\ 0 & -13 & -11 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right). \end{aligned}$$

Получили нули в последней строке или, что то же самое, $0 \cdot x_3 = 0$, это значит x_3 – любое. Одно из решений, которое называется базисным, можно найти, положив $x_3 = 0$, тогда $x_2 = \frac{2}{13}$, $x_1 = -\frac{29}{13}$.

Разобранные методы, с одной стороны, просты для восприятия и находят точное решение, однако сложны при реализации на ЭВМ, что недопустимо в наше время, когда развитие вычислительной техники продолжается высокими темпами. Почти все современные методы разрабатываются для использования на ЭВМ. В частности, такими являются итерационные методы.

2.2.3. Итерационные методы

Итерационные методы решения систем линейных уравнений отличаются самоисправляемостью и простотой реализацией на ЭВМ. Суть итерационных методов абсолютно схожа с одномерным случаем (см. п. 2.1 – методы решения алгебраических и трансцендентных уравнений). Итерационные методы требуют задания начальных приближений и каждое следующее приближение зависит от предыдущего шага-итерации (или нескольких итераций). Сходимость итерационных методов зависит от свойств матрицы системы и выбора начальных приближений.

Пусть нам дана СЛАУ $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Если систему привести к эквивалентному виду $\mathbf{x} = \mathbf{Vx} + \mathbf{C}$, тогда метод простых итераций примет следующий вид:

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{Vx}^n + \mathbf{C}.$$

Чтобы не путаться с нижними индексами элементов системы и переменных, здесь номер итерации обозначается верхним индексом.

Как и в случае решения уравнений, простота метода отражается на условиях сходимости: далеко не все системы линейных уравнений пригодны, чтобы воспользоваться данным ме-

тодом. Существует достаточное условие сходимости итерационного процесса, которое можно сформулировать в виде **теоремы о сходимости метода простых итераций**:

Если $\|\mathbf{B}\| = \max_i \sum_{k=1}^n |b_{ik}| < 1$ то система уравнений $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{C}$ имеет единственное решение и итерационный процесс $\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^n + \mathbf{C}$ сходится к решению независимо от начального приближения \mathbf{x}^0 . При этом критерием окончания итерационного процесса является условие, которое можно использовать для оценки количества итераций, необходимых для достижения заданной точности.

$$\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}\| \leq \frac{\|\mathbf{B}\|^{n+1}}{1 - \|\mathbf{B}\|} \|\mathbf{C}\|.$$

Здесь (и зачастую) в качестве начального приближения выбирается вектор свободных членов $\mathbf{x}^0 = \mathbf{C}$.

В следующем примере проверим систему на сходимость и оценим количество шагов, необходимых для достижения заданной точности $\varepsilon = 10^{-3}$

$$\begin{cases} x_1 = 0,32x_1 - 0,05x_2 + 0,11x_3 - 0,08x_4 + 2,15; \\ x_2 = 0,11x_1 + 0,16x_2 - 0,28x_3 - 0,06x_4 - 0,83; \\ x_3 = 0,08x_1 - 0,15x_2 + 0,12x_4 + 1,16; \\ x_4 = -0,21x_1 + 0,13x_2 - 0,27x_3 + 0,44. \end{cases}$$

Чтобы метод простых итераций сходился, необходимо, чтобы $\|\mathbf{B}\| = \max_i \sum_{k=1}^n |b_{ik}| < 1$. У нас система уже имеет нужный вид $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{C}$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0,32 & -0,05 & 0,11 & -0,08 \\ 0,11 & 0,16 & -0,28 & -0,06 \\ 0,08 & -0,15 & 0 & 0,12 \\ -0,21 & 0,13 & -0,27 & 0 \end{pmatrix}; \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 2,15 \\ -0,83 \\ 1,16 \\ 0,44 \end{pmatrix}; \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}.$$

Тогда имеем $\|\mathbf{B}\| = \max \{0,56; 0,61; 0,35; 0,61\} = 0,61 < 1$. Следовательно, по **теореме о сходимости метода простых итераций** система уравнений $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{C}$ имеет единственное решение и итерационный процесс $\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^n + \mathbf{C}$ сходится к решению независимо от начального приближения \mathbf{x}^0 .

Теперь оценим число необходимых шагов (итераций) для получения решения с заданной точностью $\varepsilon = 10^{-3}$. Для этого используем критерий окончания итерационного процесса

$$\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}\| \leq \frac{\|\mathbf{B}\|^{n+1}}{1 - \|\mathbf{B}\|} \|\mathbf{C}\|.$$

Мы уже нашли $\|\mathbf{B}\| = 0,61$. По аналогии можно найти $\|\mathbf{C}\| = 2,15$. Теперь подставляем всё в критерий и получаем

$$\frac{0,61^{k+1}}{0,39} \cdot 2,15 < 0,001 \Rightarrow 0,61^{k+1} < \frac{0,001 \cdot 0,39}{2,15} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (k+1) \cdot \lg 0,61 < -3 + \lg 0,39 - \lg 2,15 \Rightarrow k \geq 17.$$

Выше мы рассмотрели пример, в котором система уже приведена к нужному виду $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{C}$. Однако, очевидно, что это далеко не всегда так. Как и при решении нелинейных уравнений, существует множество подходов для приведения СЛАУ к виду $\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{C}$. Простейший способ приводит нас к итерационному методу Якоби.

Требуется решить систему уравнений $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, которая в скалярном виде запишется следующим образом:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1; \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = b_2; \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases}$$

Если из каждой строки выразить переменную, соответствующую номеру строки, то получим эквивалентную систему, в которой диагональные элементы выражены через оставшиеся

$$\begin{cases} x_1 = \frac{b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n)}{a_{11}}; \\ x_2 = \frac{b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n)}{a_{22}}; \\ \dots\dots\dots \\ x_n = \frac{b_n - (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn-1}x_{n-1})}{a_{nn}}. \end{cases}$$

или $\mathbf{x} = \beta\mathbf{x} + \gamma$.

Теперь мы можем запустить итерационный процесс $\mathbf{x}^{n+1} = \beta\mathbf{x}^n + \gamma$, взяв за начальное приближение $\mathbf{x}^0 = \gamma$

Здесь

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \dots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \dots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \dots & 0 \end{pmatrix}; \gamma = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \dots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}.$$

Для метода Якоби условие сходимости принимает несколько иной вид.

Теорема о сходимости метода Якоби

Если матрица A с диагональным преобладанием, т. е. $|a_{ii}| > \sum |a_{ij}|$ тогда метод Якоби сходится, а количество итераций для достижения заданной точности можно оценить по формуле $\|\mathbf{x}^n - \mathbf{x}\| \leq \frac{\|\beta\|^{n+1}}{1 - \|\beta\|} \|\gamma\|$.

Небольшая модификация метода Якоби приводит к **методу Гаусса – Зейделя**. Итерации по методу Зейделя отличаются от простых итераций тем, что при нахождении i -й компоненты $(k+1)$ -го приближения сразу используются уже найденные компоненты $(k+1)$ -го приближения с меньшими номерами $1, 2, 3, \dots, i-1$. При рассмотрении развёрнутой формы системы итерационный процесс записывается в виде

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \frac{b_1 - (a_{12}x_2^k + a_{13}x_3^k + \dots + a_{1n}x_n^k)}{a_{11}}; \\ x_2^{k+1} = \frac{b_2 - (a_{21}x_1^{k+1} + a_{23}x_3^k + \dots + a_{2n}x_n^k)}{a_{22}}; \\ \dots \\ x_n^{k+1} = \frac{b_n - (a_{n1}x_1^{k+1} + a_{n2}x_2^{k+1} + \dots + a_{nn-1}x_{n-1}^{k+1})}{a_{nn}}. \end{cases}$$

Другими словами, в каждое последующее уравнение подставляются значения неизвестных, полученных из предыдущих уравнений. Такая модификация в некоторых случаях ускоряет итерационный процесс по сравнению с методом Якоби.

Ещё один способ приведения системы $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ к виду, пригодному для применения метода простой итерации, абсолютно схож со способом, приведенным в одномерном случае (для решения нелинейных уравнений). Для этого нужно домножить на τ справа и слева, а затем прибавить и отнять \mathbf{x}

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow \tau \mathbf{Ax} = \tau \mathbf{b} \Rightarrow \tau \mathbf{Ax} + \mathbf{x} = \tau \mathbf{b} + \mathbf{x} \Rightarrow \mathbf{x} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{A})\mathbf{x} + \tau \mathbf{b}.$$

Тогда итерационная формула будет выглядеть следующим образом:

$$\mathbf{x}^{n+1} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{A})\mathbf{x}^n + \tau \mathbf{b}.$$

Здесь $\tau > 0$ постоянный итерационный параметр. В зависимости от выбора этого параметра можно решать системы различной сложности.

В данном пособии кратко разобраны лишь простейшие методы решения СЛАУ. В настоящее время существует целое направление в вычислительной математике, где занимаются разработкой, модификацией, тестированием методов решения систем линейных алгебраических уравнений.

Задачи для самостоятельного решения

Методом Крамера решить систему линейных уравнений и проверить ответ в Excel (воспользоваться шаблоном Ex2, страница Kramer):

$$22. \begin{cases} 7x + y = 23 \\ -5x + 3y = 1 \end{cases}, \quad 23. \begin{cases} x + 2y - z = 2 \\ 2x - 3y + 2z = 2 \\ 3x + y + z = 8 \end{cases}.$$

Методом Крамера решить систему уравнений при различных параметрах p :

$$24. \begin{cases} px + 30y = p + 30 \\ 30x + py = 0 \end{cases}.$$

Методом Гаусса решить систему уравнений и проверить ответ в Excel (воспользоваться шаблоном Ex2, страница Gauss):

$$25. \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 11 \\ 3x_1 - x_2 = 12 \end{cases} \quad 26. \begin{cases} 3x + 2y - 5z = -1 \\ 2x - y + 3z = 13 \\ x + 2y - z = 9 \end{cases} \quad 27. \begin{cases} x + 2y + 3z = 1 \\ 2x - y + 2z = 6 \\ x + y + 5z = -1 \end{cases}$$

$$28. \begin{cases} 8x_1 + 7x_2 + 3x_3 = 18 \\ -7x_1 - 4x_2 - 4x_3 = -11 \\ -6x_1 + 5x_2 - 4x_3 = -15 \end{cases} \quad 29. \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 + 4x_3 + x_4 = 20 \\ x_1 + 3x_2 + 2x_3 + x_4 = 11 \\ 2x_1 + 10x_2 + 9x_3 + 7x_4 = 40 \\ 3x_1 + 8x_2 + 9x_3 + 2x_4 = 37 \end{cases}$$

Методом итераций решить систему линейных уравнений в Excel (воспользоваться шаблоном Ex2, страница Iter):

$$30. \begin{cases} x_1 = 0,32x_1 - 0,05x_2 + 0,11x_3 - 0,08x_4 + 2,15 \\ x_2 = 0,11x_1 + 0,16x_2 - 0,28x_3 - 0,06x_4 - 0,83 \\ x_3 = 0,08x_1 - 0,15x_2 + 0,12x_4 + 1,16 \\ x_4 = -0,21x_1 + 0,13x_2 - 0,27x_3 + 0,44 \end{cases}$$

Методом итераций решить системы линейных уравнений в Excel (воспользоваться шаблоном Ex2, страница Iter), предварительно приведя их к виду, удобному для итераций и оценив число необходимых шагов, для достижения точности $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$:

$$31. \begin{cases} -0,32x_1 - 1,27x_2 + 0,27x_3 - 0,18x_4 = -0,36 \\ 0,45x_1 - 1,23x_2 + 0,06x_3 = 0,88 \\ 0,31x_1 + 0,08x_2 - 0,77x_3 - 1,12x_4 = 0,55 \\ 0,05x_1 - 0,26x_2 - 0,34x_3 - 1,12x_4 = 1,17 \end{cases}$$

$$32. \begin{cases} -0,79x_1 + 0,31x_2 - 0,72x_4 = -0,11 \\ 0,54x_1 - x_2 - 1,31x_3 + 0,85x_4 = -0,52 \\ 0,11x_1 - 1,08x_2 + 0,78x_4 = -0,85 \\ 0,08x_1 + 0,09x_2 + 0,33x_3 - 0,79x_4 = 1,7 \end{cases}$$

$$33. \begin{cases} -x_1 + 0,24x_2 - 0,48x_3 + 0,23x_4 = 0,39 \\ -0,05x_1 - x_2 + 0,44x_3 + 0,31x_4 = 0,72 \\ -1,1x_1 + 0,27x_2 - 1,48x_3 - 0,32x_4 = 0,95 \\ -0,88x_1 + 0,17x_2 - 0,37x_3 - 0,77x_4 = 0,86 \end{cases}$$

$$34. \begin{cases} -x_1 + 0,22x_2 - 0,11x_3 + 0,31x_4 = -2,7 \\ -0,62x_1 - 0,78x_2 - 0,23x_3 + 0,53x_4 = -1,2 \\ 0,28x_1 + 0,22x_2 - 0,69x_3 - 1,51x_4 = -1,03 \\ 0,17x_1 - 0,21x_2 + 0,31x_3 - x_4 = 0,17 \end{cases}$$

2.3. Интерполяция и аппроксимация

Интерполяция, интерполирование – способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений (см. рис. 2.9).

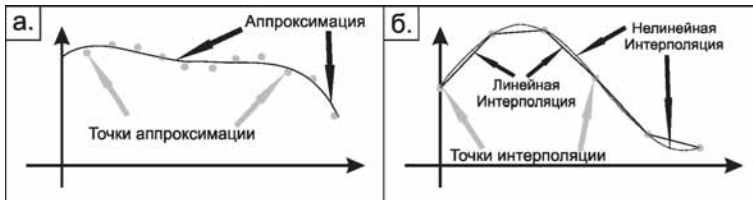


Рис. 2.9. Примеры аппроксимации (а) и интерполяции (б)

Практически в любой науке или в инженерном деле часто приходится оперировать набором значений, полученных опытным путём. Нет сомнений, что это касается и геофизических задач. Как правило, на основании этих наборов требуется построить функцию, на которую могли бы с высокой точностью попадать другие получаемые значения. Такая задача называется **аппроксимацией** (см. рис. 2.9а). **Интерполяцией** называют такую разновидность аппроксимации, при которой кривая построенной функции проходит точно через имеющиеся точки данных (см. рис. 2.9б).

Существует также близкая к интерполяции задача, которая заключается в аппроксимации какой-либо сложной функции другой, более простой функцией. Если некоторая функция слишком сложна для производительных вычислений, можно попытаться вычислить её значение в нескольких точках, а по ним построить, то есть интерполировать, более простую функцию. Разумеется, использование упрощённой функции не по-

зволяет получить такие же точные результаты, какие давала бы первоначальная функция. Но в некоторых классах задач достигнутый выигрыш в простоте и скорости вычислений может перевесить получаемую погрешность в результатах.

Ещё раз определим, что такое интерполяция, но теперь уже на математическом языке. Рассмотрим систему несовпадающих точек $x_i, i = 1, 2, \dots, N$ (см. рис. 2.10), которые будем называть узлами интерполяции.

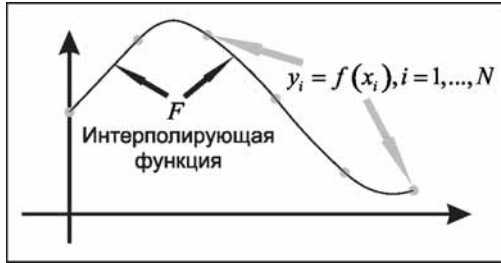


Рис. 2.10. Интерполяция по набору значений

Расстояние между соседними узлами $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ – это шаг интерполяции, который может быть как равномерным, так и переменным в зависимости от задачи. В каждом узле известно значение функции (или значения, полученные опытным путём) $y_i = f(x_i), i = 1, 2, \dots, N$. Задача интерполяции состоит в поиске **интерполирующей функции** F , значение которой в узлах совпадает с известными данными: $F(x_i) = y_i = f(x_i), i = 1, 2, \dots, N$.

Простейшим примером является **линейная интерполяция** – интерполяция алгебраическим двучленом (линейной функцией) $ax + b$ по двум заданным узлам x_0, x_1 , значения в которых y_0, y_1 соответственно. Если у нас будет задано больше двух узлов, то интерполирующая функция будет кусочно-гладкой, где на каждом отрезке будет подбираться отдельный двучлен. Геометрически линейная интерполяция эквивалента построению (нахождению уравнения) прямой, проходящей через 2 точки: $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$. Уравнение прямой, проходящей через 2 точки, имеет вид

$$\frac{y - y_0}{y_1 - y_0} = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Тогда можно найти интерполирующую функцию F (см. рис. 2.11), которая позволяет найти нам промежуточные значения по имеющимся двум

$$F = y = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \cdot (x - x_0).$$

Если у нас задана сложная нелинейная функция $f(x)$, значение которой мы можем вычислить в заданных узлах x_i , $i = 1, 2, \dots, N$, тогда через каждые 2 точки $(x_i, f(x_i))$, $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ легко построить интерполирующую функцию. Таким образом, мы построим линейное приближение заданной функции $f(x)$ (см. рис. 2.11). Такая интерполяция – простейший пример линеаризации функции – замена сложной функции линейной. Такой подход позволяет решать ряд задач с некоторой точностью, в частности, численно интегрировать.

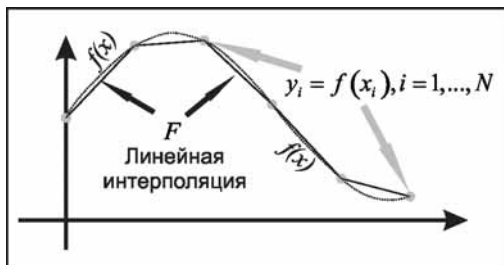


Рис. 2.11. Линейная интерполяция (линеаризация)

Очевидно, что такая грубая интерполяция даёт нам значительные ошибки при вычислении промежуточных значений. А чтобы уменьшить эти ошибки, нужно задавать больше точек интерполяции. Однако понятно, что, во-первых, это приводит к увеличению времени вычислений и необходимости увеличивать мощность расчётных компьютеров, во-вторых, если мы имеем дело с экспериментальными (полевые в случае геофизических задач) данными, то после окончания полевых работ уже

нельзя увеличить количество точек измерения. Поэтому были разработаны и развиваются в настоящее время другие методы интерполяции, которые позволяют получать промежуточные значения с большей точностью. Простейшие из них мы разберём ниже.

2.3.1. Интерполяция каноническим полиномом Интерполяция полиномом Лагранжа. Полином Ньютона и сплайн-интерполяция

Рассмотренная нами выше линейная интерполяция – это частный случай интерполяции каноническим полиномом (степень полинома 1), где в качестве интерполирующей функции выбирается полином степени n в каноническом виде

$$F(x) = P_n(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + \dots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0.$$

Стоит заметить, что степень полинома будет на единицу меньше количества известных значений (если известно $n+1$ промежуточное значение, то степень канонического полинома n). Из теории функций известно, что такой полином **существует и он единственный**. Коэффициенты полинома определяются из условий интерполяции $y_i = f(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$. Таким образом, получим систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} c_n x_0^n + c_{n-1} x_0^{n-1} + \dots + c_2 x_0^2 + c_1 x_0 + c_0 = y_0; \\ c_n x_1^n + c_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + c_2 x_1^2 + c_1 x_1 + c_0 = y_1; \\ \dots \\ c_n x_n^n + c_{n-1} x_n^{n-1} + \dots + c_2 x_n^2 + c_1 x_n + c_0 = y_n. \end{cases}$$

Решив эту систему, найдём наш интерполянт – полином степени n .

В качестве примера построим канонический полином, проходящий через три известные точки, которые приведены в табл. 2.1. Понятно, что полином будет иметь степень 2, где неизвестно 3 коэффициента

$$F(x) = P_2(x) = c_2 x^2 + c_1 x + c_0$$

Таблица 2.1

(x_i, y_i) \ Номер узла (i)	0	1	2
x_i	0	1	2
y_i	0	1	4

Пользуясь таблицей, можно составить СЛАУ 3×3 , решив которую, мы найдём неизвестные коэффициенты

$$\begin{cases} c_2 x_0^2 + c_1 x_0 + c_0 = y_0 \\ c_2 x_1^2 + c_1 x_1 + c_0 = y_0 \\ c_2 x_2^2 + c_1 x_2 + c_0 = y_0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_2 \cdot 0 + c_1 \cdot 0 + c_0 = 0 \\ c_2 \cdot 1 + c_1 \cdot 1 + c_0 = 1 \\ c_2 \cdot 4 + c_1 \cdot 2 + c_0 = 4 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_0 = 0; \\ c_1 = 0; \\ c_2 = 1. \end{cases}$$

Теперь мы можем записать наш канонический полином с найденными коэффициентами

$$F(x) = P_2(x) = x^2.$$

Но как мы убедились в пункте 2.2, не каждая система легко разрешима. Отчасти из-за этого появились другие способы построения интерполяционной функции. Рассмотрим один из таких случаев – это **интерполяционный полином Лагранжа**, который строится в виде суммы

$$F(x) = L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) y_i.$$

здесь $l_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n$ – функции аргумента x , называемые **коэффициентами Лагранжа**. Эти коэффициенты строятся, основываясь на принципе интерполяции: должно выполняться условие совпадения интерполирующей функции со значениями в известных точках

$$L_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Значит, на **коэффициенты Лагранжа** налагаются следующие требования:

$$l_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = 0, 1, \dots, n,$$

где $\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$ — это символ Кронекера. Если это условие будет выполнено, то **полином Лагранжа** будет совпадать с известными значениями. Чтобы обеспечить такое условие на коэффициенты Лагранжа, представим их в виде произведения, которое будет являться полиномом степени n

$$l_i(x) = c_i(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n),$$

где c_i пока ещё неизвестный постоянный коэффициент, который можно определить из условия $l_i(x_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 0, 1, \dots, n$. Значит, $l_i(x) = 1$ поэтому

$$\frac{1}{c_i} = \prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j) \Rightarrow c_i = \frac{1}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}.$$

Возвращаясь на шаг назад, получим формулу для **коэффициентов Лагранжа**

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}.$$

Тогда интерполяционный **многочлен Лагранжа** примет вид

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x)y_i = \sum_{i=0}^n \left(y_i \cdot \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right).$$

Для наглядной демонстрации построения **многочленов Лагранжа** разберём пример, представленный в табл. 2.1 и уже интерполированный каноническим полиномом, где заданы три точки. Используя эти данные, построим многочлен Лагранжа. Разберём последовательно все этапы: построение коэффициентов Лагранжа, умножение на значения функции в точке и суммирование полученных выражений.

Итак, у нас есть три точки $n = 2$. Построим три соответствующих коэффициента Лагранжа исходя из формулы

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}.$$

$$l_0(x) = \prod_{j=0, j \neq 0}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_0 - x_j)} = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 1)(x - 2)}{(0 - 1)(0 - 2)} = \frac{1}{2}(x - 1)(x - 2);$$

$$l_1(x) = \prod_{j=0, j \neq 1}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_1 - x_j)} = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 0)(x - 2)}{(1 - 0)(1 - 2)} = -x(x - 2);$$

$$l_2(x) = \prod_{j=0, j \neq 2}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_2 - x_j)} = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 0)(x - 1)}{(2 - 1)(2 - 2)} = \frac{1}{2}x(x - 2).$$

Построенные многочлены можно изобразить на координатной плоскости (см. рис. 2.12а). Хорошо видно, что каждый из многочленов $l_i(x)$ принимает нулевое значение во всех $x_{j \neq i}$, $j = 0, 1, 2$. Во всех точках он равен нулю, кроме одной, в которой он равен единице. То есть $l_i(x_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 0, 1, \dots, n$ где $\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$ — это символ Кронекера. На рис. 2.12а эти точки отмечены кружками для $l_0(x)$, квадратами — для $l_1(x)$, треугольниками — для $l_2(x)$. Кривые, проходящие через отмеченные точки, соответствуют коэффициентам Лагранжа $l_i(x)$. Теперь нам осталось умножить каждый из коэффициентов Лагранжа на соответствующее значение функции y_i и сложить эти произведения

$$L_2(x) = \sum_{i=0}^2 \left(y_i \cdot \prod_{j=0, j \neq i}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right) = y_0 \cdot l_0(x) + y_1 \cdot l_1(x) + y_2 \cdot l_2(x) = x^2.$$

Таким образом, мы получили интерполяционный полином Лагранжа, проходящий через три известные точки, представленные в табл. 2.1. На рис. 2.12б теми же фигурами (круг, квадрат и треугольник) обозначены произведения $y_i \cdot l_i(x)$ в заданных точках, а кривые, проходящие через эти точки, соответствуют графику функций $y_i \cdot l_i(x)$. Такие произведения равны нулю во всех точках, кроме одной $y_i \cdot l_i(x_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ y_i, & i = j \end{cases}$. Тогда их сумма будет принимать нужные значения, интерполирующий многочлен Лагранжа $L_2(x)$ будет удовлетворять главному принципу интерполяции (проходить через все известные точки). На рис. 2.12б $L_2(x)$ изображён сплошной линией.

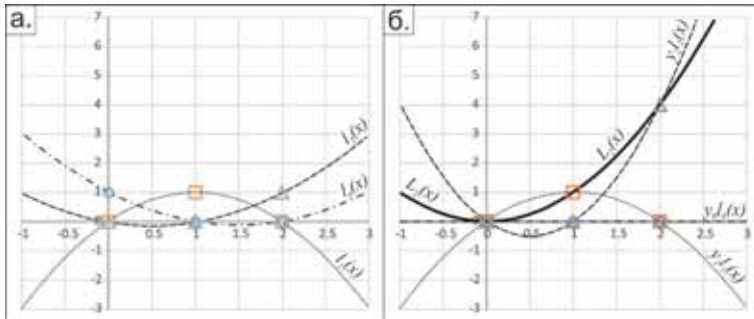


Рис. 2.12. Иллюстрация построения интерполяционного полинома Лагранжа

Разобранные выше методы могут быть применены к произвольному набору узлов. Но зачастую интерполяцию нужно провести для данных, которые заданы на регулярной сетке, а это в свою очередь упрощает нахождение интерполянта. Одним из таких интерполянтов является **интерполяционный полином Ньютона**.

Рассмотрим случай, когда известны значения интерполируемой функции $f(x)$ в равноотстоящих узлах. Тогда узлы интерполяции можно выразить через постоянный параметр h , который называется шагом интерполяции

$$x_i = x_0 + i \cdot h, i = 0, 1, \dots, n.$$

В итоге для интерполяции достаточно иметь начальный узел интерполяции x_0 , шаг интерполяции h и $n+1$ значение неизвестной функции $f(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$ в узлах интерполяции. Будем строить полином $P_n(x)$ степени n на равномерной сетке, который удовлетворяет основному принципу интерполяции: $P_n(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$. Такие полиномы были впервые построены Ньютоном и называются **интерполяционными полиномами Ньютона**.

Мы рассмотрим только первый полином Ньютона, который строится по формуле

$$P_n(x) = a_0 + \sum_{i=1}^n \left(a_i \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \right),$$

или в развёрнутом виде:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}).$$

Как и в прошлых случаях коэффициенты a_i нужно выразить через известные величины, используя основной принцип интерполяции – прохождение графика полинома через все точки заданной системы. В данном случае известно $x_0, h, y_i, i = 0, 1, \dots, n$.

Легко заметить, что подстановка $x = x_0$ в полином $P_n(x)$ даёт нам значение свободного члена первого полинома $a_0 = P_n(x_0) = y_0$.

Для выражения остальных коэффициентов полинома введём понятия **конечных разностей**. Если у нас задана некоторая функция $f(x)$, а приращение аргумента (шаг) постоянно $\Delta x = h$, тогда величина

$$\Delta y = \Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = f(x + h) - f(x)$$

называется **первой конечной разностью** функции $y = f(x)$. Нетрудно заметить, что при постоянном шаге конечная разность является функцией аргумента x , а конечные разности высших порядков определяются индуктивно (каждая последующая выражается через предыдущие)

$$\Delta^n y = \Delta (\Delta^{n-1} y), n = 2, 3, \dots$$

Например, **вторая конечная разность** примет следующий вид:

$$\Delta^2 y = \Delta(\Delta x) = \Delta(f(x + h) - f(x)) = f(x + 2h) - 2f(x + h) + f(x).$$

Теперь мы можем вернуться к коэффициентам полинома Ньютона, которые можно записать в следующем виде:

$$a_i = \frac{\Delta^i(y_0)}{i! h^i}.$$

Тогда интерполяционный полином примет следующий вид:

$$P_n(x) = a_0 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\Delta^i(y_0)}{i!h^i} \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) \right).$$

То, что построенный полином удовлетворяет принципу интерполяции, проверяется подстановкой узлов интерполяции в формулу.

Для практических расчётов полином Ньютона удобнее представить, введя новую переменную

$$q = \frac{x - x_0}{h}.$$

Тогда интерполяционный полином Ньютона примет следующий вид:

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta^1 y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)}{n!} \Delta^n y_0.$$

Если рассмотреть частный случай (первый порядок полинома Ньютона), то можно получить уже известную нам формулу линейной интерполяции

$$P_1(x) = y_0 + q\Delta y_0 = y_0 + \frac{x - x_0}{h} (y_1 - y_0).$$

Как показала практика, чтобы найти промежуточное значение, не всегда целесообразно строить полином по всем известным узлам. На практике чаще всего заранее выбирается степень интерполирующего полинома, и выбирается ряд узлов, лежащих рядом с неизвестным значением.

В качестве примера можно привести задачу нахождения значения функции $y = f(x)$ для аргумента $x = 3,22$. Исходные данные (узлы и значения функции в них) сведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

<i>Номер узла (i)</i> (x_i, y_i)	0	1	2	3	4	5	6
x_i	3,0	3,1	3,2	3,3	3,4	3,5	3,6
y_i	0,55	0,45	0,365	0,293	0,234	0,185	0,146

В данном случае можно ограничиться полиномом третьего порядка $P_3(x)$ а за начальный узел выбрать ближайший, лежащий слева. Если мы ограничились третьим порядком полинома, то будем использовать 4 узла $x_i > 3,2$. Нам понадобятся конечные разности, поэтому составим таблицу. Будем использовать то, что конечную разность порядка выше первого можно вычислять как разность разностей предыдущего порядка. Ниже приведена табл. 2.3 конечных разностей.

$$\text{Вспомогательный параметр } q = \frac{x - x_0}{h} = \frac{3,22 - 3,2}{0,1} = 0,2.$$

Таблица 2.3

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
0	3,2	0,365	-0,072	0,013	-0,003
1	3,3	0,293	-0,059	0,01	
2	3,4	0,234	-0,049		
3	3,5	0,185			

Тогда полином Ньютона примет вид

$$\begin{aligned} P_3(x = 3,22) &= y_0 + q\Delta^1 y_0 + \frac{q(q-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!} \Delta^3 y_0 = \\ &= 0,365 + 0,2 \cdot (-0,072) + \frac{0,2 \cdot (0,2 - 1)}{2!} \cdot 0,013 + \\ &\quad + \frac{0,2 \cdot (0,2 - 1) \cdot (0,2 - 2)}{3!} \cdot (-0,003) \approx 0,349. \end{aligned}$$

Таким образом, мы нашли значение функции в интересующей нас точке с помощью полинома Ньютона. Нетрудно догадаться, что найденное значение с помощью интерполяции далеко не всегда является точным значением искомой функции и каждый интерполянт имеет свою точность. Погрешности интерполяционных формул можно найти и оценить, но в данном курсе мы не будем касаться этой темы.

Интерполяционные полиномы, представленные выше, можно считать «классическими». В XX в. получила широкое распространение в практике интерполяция *сплайнами*. Сплай-

ном (*spline*) называли гибкую металлическую линейку – универсальное лекало, которое использовали чертёжники для того, чтобы гладко соединить отдельные точки на чертеже, то есть для графического исполнения интерполяции. Понятие сплайнов возникло в авиастроении при конструировании обтекаемых профилей.

Сплайном $S(x)$ является интерполирующая функция, которая удовлетворяет принципу интерполяции $S(x_i) = y_i = f(x_i)$ и условию минимальности потенциальной энергии гибкого стержня, проходящего через точки интерполяции. Чтобы удовлетворить этому условию, необходимо найти минимум выражения

$$\int_{x_0}^{x_n} (S''(x))^2 dx.$$

Особенно часто используется *естественный кубический сплайн* – полином третьей степени, удовлетворяющий приведённым выше условиям. Такой интерполянт является непрерывной функцией с первой и второй производной на интервале (x_0, x_n) . Понятно, что нам требуется построить сплайн для каждого подинтервала (x_p, x_{p+1}) , при этом ещё и связать их между собой. Требование непрерывности функции, её первой и второй производных, основной принцип интерполяции и условия в граничных точках (x_0, x_n) позволяют решить эту задачу и определить все неизвестные.

Более подробно ознакомиться с построением кубических сплайнов можно во многих курсах, в частности, в курсе «Численные методы» [14].

Как мы видели при построении полинома Ньютона, в приведённом примере не обязательно использовать все известные узлы интерполяции. Это может снизить качество интерполяции, но значительно сократить как машинные, так и временные затраты. В связи с этим выделяют локальную и глобальную интерполяцию. Нетрудно догадаться, что при использовании глобальной интерполяции используются все известные узлы. А при локальной – только близкие к интересующему нас интервалу. Использование того или иного вида интерполяции зависит от поставлен-

ной задачи. Это говорит о том, что интерполяция, как и большинство действий в математическом моделировании, является творческим процессом. Но далеко не всегда удаётся построить гладкую и адекватную (без выбросов) функцию, проходящую через все известные нам точки. Здесь стоит вспомнить, что интерполяция – это частный случай аппроксимации, где построенная функция не обязательно должна проходить через все известные значения, а максимально близко приближаться к ним. Некоторые простейшие методы аппроксимации разобраны ниже.

2.3.2. Аппроксимация данных. Уравнение линейной регрессии

Задачей аппроксимации, как и интерполяции, является исследование двух непрерывных переменных величин x и y . Явный вид функциональной зависимости $y = f(x)$ неизвестен. В нашем распоряжении имеется конечное число значений исследуемой функции y_i в определённых узлах $x_i, i = 1, 2, \dots, n$. Нам требуется найти функцию $y = f(x)$. Если в случае интерполяции эта функция проходила через все заданные значения, то здесь это не принципиальное условие. Также в задаче аппроксимации, помимо известных значений, привлекается дополнительная информация для определения аппроксиманта (аппроксимирующей функции). В итоге имеем два дополнительных условия:

Во-первых, заданные значения функции $y_i, i = 1, 2, \dots, n$ не являются абсолютно точными, а содержат некоторые погрешности. Например, если данные были получены экспериментально, то они неизбежно содержат приборную и случайную погрешности измерения.

Во-вторых, исходя из некоторых теоретических соображений (предварительных исследований) выбирается класс, которому принадлежит аппроксимирующая функция $f(x)$. Например, физическая теория установила, что зависимость должна быть линейной, т. е. представляться формулой $y = ax + b$. Помимо линейной, взаимосвязь может быть полиномиальной, гармонической, экспоненциальной и т. д.

Простейший пример из физики – это определение сопротивления R металлического проводника с помощью закона Ома:

$$I = \frac{U}{R}.$$

Сила тока I прямо пропорциональна (линейная зависимость) приложенной разности потенциалов U . Чтобы найти значение сопротивления R , нужно произвести n измерений силы тока I_i при различных напряжениях U_i , $i = 0, 1, \dots, n$. То есть нужно найти числовой параметр (в данном случае $1/R$).

Опыт показывает, что, имея такие экспериментальные измерения и зная класс, которому принадлежит аппроксимирующая функция, как правило, невозможно подобрать параметр так, чтобы график прошёл через все полученные в эксперименте точки. Например, при исследовании металлического проводника измеренные пары не ложатся строго на прямую (см. рис. 2.13). Как уже говорилось, это связано с тем, что измеренные значения содержат погрешности. Поэтому приближение исследуемой функции при наличии погрешностей не требует строгого выполнения основного принципа интерполяции (когда искомая функция проходит через все заданные точки).

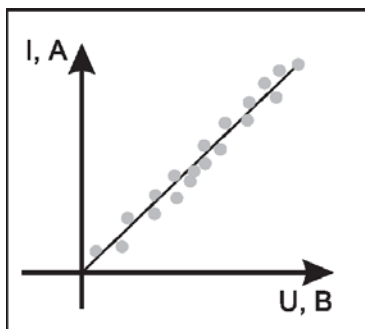


Рис. 2.13. Эксперимент по определению сопротивления проводника. Точки – измерения, прямая – вычисленная зависимость

Таким образом, можем сформулировать задачу аппроксимации в общем виде:

Даны n пар значений аргумента и функции (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$. Кроме того, известен общий вид искомой функции

$$y = f(x, A, B, C, \dots),$$

которая связывает исследуемые переменные величины x и y . Здесь A, B, C, \dots – неизвестные постоянные параметры, которые нужно определить, используя имеющиеся данные. Определив эти параметры, мы найдём зависимость между x и y , которая называется *аппроксимирующей функцией* или *аппроксимантом*. Методы получения таких функций называются *аппроксимацией*.

Ещё раз заметим: предполагается, что исходные данные известны нам с некоторой погрешностью, поэтому и искомые параметры A, B, C, \dots ищутся с некоторым приближением. То есть методы аппроксимации дают нам не истинную функцию $y = f(x)$ а некоторое её приближение. Следовательно, задача аппроксимации сводится к методике нахождения параметров A, B, C, \dots которые обеспечивают «наилучшее» приближение аппроксимирующей функции к истинной зависимости. Критерий «наилучшего» приближения базируется на минимизации отклонений значений построенной функции $y = f(x, A, B, C, \dots)$ в узлах x_i от соответствующих величин y_i .

Существует множество оценок качества аппроксимации и различных критериев «наилучшего» приближения. Одним из самых очевидных условий является среднее арифметическое абсолютных значений отклонений $|f(x, A, B, C, \dots) - y_i|$, а одной из самых распространённых оценок является *среднеквадратическое отклонение*, известное из курса математической статистики. В наших обозначениях эта оценка будет выражаться следующей формулой:

$$s = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n [f(x_i, A, B, C, \dots) - y_i]^2}.$$

Ещё раз стоит подчеркнуть различия между задачами аппроксимации и интерполяции. Если в интерполяции график функции проходит через все заданные точки, то при аппроксимации это требование не обязательно, но должен выполняться критерий «наилучшего» приближения. Одним из наиболее распространённых подходов аппроксимации является *метод наименьших квадратов*.

Нетрудно представить, что уменьшение отклонения в одной из точек может привести к увеличению для другой. Практически никогда при аппроксимации не удаётся уменьшить до нуля все абсолютные значения отклонений. Поэтому важно однозначно сформулировать критерий, по которому будет определяться «наилучшее» приближение аппроксимирующей функции к экспериментальным данным.

Если после выбора класса аппроксимирующей функции $f(x, A, B, C, \dots)$ которая содержит определённое количество неизвестных параметров, записать следующую **сумму квадратов** разностей (приближений, отклонений):

$$Q = \sum_{i=0}^n [f(x_i, A, B, C, \dots) - y_i]^2,$$

то искомыми параметрами будут числа A, B, C, \dots , которые обеспечивают минимум суммы Q . Изменяя величины A, B, C, \dots , можно добиться уменьшения **суммы квадратов** до её **минимального** значения. Отсюда и название – **метод наименьших квадратов**.

На этапе поиска минимизирующих значений параметров A, B, C, \dots , сумма Q рассматривается как функция от переменных A, B, C, \dots . Исходные данные (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$ в этом случае являются постоянными числами.

Известно, что необходимым условием экстремума (в данном случае минимума) функции нескольких переменных является равенство нулю всех первых частных производных. Следовательно, нужно продифференцировать сумму Q по каждому из параметров A, B, C, \dots и приравнять эти производные к нулю

$$\frac{\partial Q}{\partial A} = 0; \quad \frac{\partial Q}{\partial B} = 0; \quad \frac{\partial Q}{\partial C} = 0; \quad \dots'$$

При этом мы получаем систему уравнений для нахождения параметров A, B, C, \dots . Важно, что количество уравнений равно количеству неизвестных. В некоторых случаях, например, если выбран полиномиальный класс аппроксимирующих функций, получим СЛАУ, решение которой не вызывает принципиаль-

ных трудностей. Но часто вид аппроксиманта таков, что получаются системы нелинейных уравнений, которые решаются гораздо сложнее.

Вернёмся к аппроксимирующим функциям, которые представляются в виде алгебраических полиномов с действительными коэффициентами. В этом случае задача нахождения минимизирующих значений параметров A, B, C, \dots становится достаточно простой. Выбрав такой класс аппроксимантов, мы можно записать

$$f(x, A, B, C, \dots) = P_m(x) = \sum_{j=0}^m a_j x^j,$$

где $m \leq n$. Напомним, что $n+1$ – число узлов таблицы исходных данных $(x_i, y_i), i = 0, 1, \dots, n$

Теперь задача сводится к вычислению таких коэффициентов полинома a_j , которые минимизируют сумму квадратов отклонений аппроксиманта (в данном случае полинома) в заданных узлах x_i от известных значений $y_i, i = 0, 1, \dots, n$.

$$Q = \sum_{i=0}^n [f(x_i, A, B, C, \dots) - y_i]^2 = \sum_{i=0}^n [P_m(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=0}^n \left[\sum_{j=0}^m a_j x_i^j - y_i \right]^2.$$

Полином степени m содержит $m+1$ коэффициент. Чтобы найти их, как уже говорилось выше, представим $a_j, j = 0, 1, \dots, m$ переменными и найдём частные производные суммы квадратов отклонений Q . Для нахождения наименьшей суммы квадратов необходимо приравнять к нулю найденные производные. Получится система из $m+1$ уравнений

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 0; \quad k = 0, 1, \dots, m.$$

Эта система, в случае полиномиального класса аппроксимирующих функций, является линейной относительно неизвестных коэффициентов a_j , минимизирующих значение выражение Q , которое по сути тоже является полиномом. В явном виде эта система выглядит следующим образом:

$$\sum_{i=0}^n \left[y_i - \sum_{j=0}^m a_j x_i^j \right] x_i^k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, m.$$

Если преобразовать полученную СЛАУ к стандартному виду и выделить столбец свободных членов, то полученную систему можно решить с помощью любого подходящего метода решения систем линейных алгебраических уравнений, некоторые из которых были разобраны в п. 2.2.

Частным случаем аппроксимации полиномами является уравнение линейной регрессии, или аппроксимация линейной функцией (полином степени $m = 1$). Тогда

$$f(x, A, B, C, \dots) = P_1(x) = \sum_{i=0}^1 a_j x^j = a_0 + a_1 x.$$

Нетрудно выразить коэффициенты

$$a_1 = \frac{(n+1) \sum_{i=0}^n x_i y_i - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right) \left(\sum_{i=0}^n y_i \right)}{(n+1) \sum_{i=0}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right)^2};$$

$$a_0 = \frac{\left(\sum_{i=0}^n x_i^2 \right) \left(\sum_{i=0}^n y_i \right) - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right) \left(\sum_{i=0}^n x_i y_i \right)}{(n+1) \sum_{i=0}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^n x_i \right)^2}.$$

Используя выписанные коэффициенты, уже можно пользоваться линейным аппроксимантом, но часто уравнение линейной регрессии записывают через статистические характеристики

$$P_1(x) = a_0 + a_1 x = \bar{y} + r \frac{\sigma_y}{\sigma_x} (x - \bar{x}).$$

Здесь $\bar{x} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n x_i$ – среднее или математическое ожидание, $\sigma_x = \sqrt{\sum_{i=0}^n (x_i - \bar{x})^2}$ – среднеквадратическое отклонение (квадратный корень из дисперсии), $r = \frac{K_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}$ – коэффициент корреляции, $K_{xy} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$ – корреляционный момент (или ковариация).

Приведённые формулы линейной регрессии эквивалентны и легко выводятся одна из другой.

Ещё раз стоит заострить внимание на том, что интерполяция – это частный случай аппроксимации. Более того, часто под аппроксимацией и интерполяцией понимается одно и то же. Основное отличие – в интерполяции точки проходят через известные (заданные) узлы, аппроксимация же ищет функцию (аппроксимант), проходящую наиболее близко к заданным точкам. Также чаще всего методы аппроксимации выдают явное значение функции (более того, нередко бывает, что класс функций нам заранее известен), а интерполяция находит промежуточные значения и не обязательно знает интерполянт в явном виде.

Таким образом, мы кратко изучили методы интерполяции и аппроксимации. Можно сказать, что интерполяция – это «идеальная» аппроксимация. Ведь в аппроксимации вводится понятие отклонений, а при интерполяции функция проходит через все заданные узлы, а значит, все отклонения являются нулевыми. Но на практике не всегда нужна «идеальная» аппроксимация, да и зачастую это невозможно. Процесс аппроксимации же в свою очередь можно отнести к методам оптимизации, так сказать нахождение «наилучшего» приближения экспериментальных и теоретических (рассчитанных) данных. Поиск такого оптимального приближения в геофизике не редкость, а задача, которая решается при этом, называется *обратной задачей геофизики* (см. гл. 1). В следующем пункте мы дадим понятие оптимизации и приведём несколько самых распространённых методов этого процесса.

2.3.3. Методы оптимизации

Всем нам хорошо известна задача оптимизации (поиска экстремума) в одномерном случае. Если у нас задана функция на отрезке, то чтобы найти её минимум, нужно найти значение этой функции в точках, где производная равна нулю и на концах отрезка (будем считать, что функция непрерывна вместе со своей первой производной на заданном отрезке). Наибольшее (наименьшее) значение из найденных и будет решением нашей задачи поиска экстремума. В случае оптимизации обычно ищут наименьшее значение какого-либо функционала (целевой функ-

ции), составленного по определённым правилам, удовлетворяющего некоторым критериям. Итак, *оптимизация* в математике, информатике и других науках – это задача нахождения экстремума (в геофизике чаще минимума) целевой функции в некоторой ограниченной области конечномерного векторного пространства (в геофизике чаще всего это физические параметры среды).

Основной целью всех геофизических исследований является решение обратной задачи, т. е. определение строения среды по измеренным характеристикам поля. Как правило, параметры, определяющие строение среды, входят в уравнения, которым удовлетворяет поле. Если семейство математических моделей построено и алгоритм решения прямой задачи известен, то общая формулировка обратной задачи геофизики будет следующей:

$\mathbf{p} = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ – множество параметров модели;

$\mathbf{p} \in \mathbf{P}$ – множество допустимых значений параметров.

$A_x[\mathbf{p}]$ – оператор решения прямой задачи, чаще всего какой-то алгоритм (набор действий), который позволяет получить определённую характеристику физического поля в зависимости от параметров среды в заданной точке x .

U_x^o – измеряемая на практике характеристика физического поля, полученная в точке x , которая зависит от параметров среды, возможно не так просто, как в модельной среде, но тем не менее зависимость несомненно есть.

Нам нужно найти $\mathbf{p} = \mathbf{p}^*$ такое, чтобы отклонение экспериментальных и теоретических данных было минимальным. Для этого составляется целевая функция (функционал $F(x)$), которая и будет подвергаться оптимизации. В частности, если вернуться к аппроксимации, где разбирался метод наименьших квадратов, то можно воспользоваться таким же функционалом

$$F(x) = \sum_x (A_x[\mathbf{p}] - U_x^o)^2 \rightarrow \min.$$

Это простейшая целевая функция, минимизировав которую мы сможем получить оптимальный набор параметров

$p = p^*$. Составлению таких функционалов посвящены целые направления в математическом моделировании, как и разработке методов оптимизации.

В качестве простейшего одномерного метода оптимизации можно привести метод дихотомии (деление отрезка пополам). Представим, что составленный нами функционал является одномерной функцией (т. е. вместо множества параметров среды нужно найти всего лишь один параметр). Тогда такую задачу можно решить одним из любых методов решения уравнений, в частности, методом дихотомии. Ясно, что этот метод работает далеко не во всех случаях. В принципе универсальных методов оптимизации не существует. Каждую целевую функцию стоит исследовать, чтобы подобрать наиболее подходящий алгоритм нахождения экстремума. Рассмотрим суть некоторых из наиболее распространённых методов оптимизации.

Первый метод, представленный в данном пособии – *метод Гаусса – Зейделя*. Этот метод не зря называется так же, как и один из алгоритмов решения СЛАУ. Суть метода абсолютно одинакова с разобранным в п. 2.2.3. Это итерационный прямой метод, в котором по очереди минимизируется функция вдоль каждой из координат, и соответствующий результат используется на следующей итерации (см. рис. 2.14).

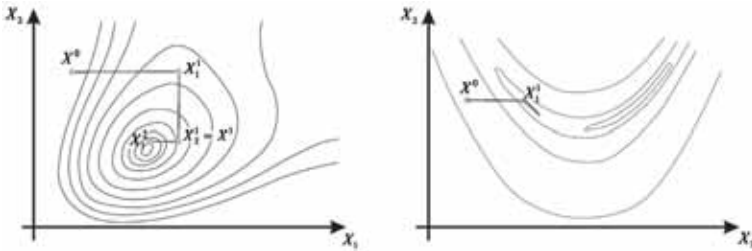


Рис. 2.14. Иллюстрация оптимизационного метода Гаусса – Зейделя

Если мы минимизируем функцию только по одной координате, то соответственно все другие становятся постоянными и можно использовать любой из одномерных методов поиска экстремума, чаще всего – это метод Ньютона. Таким образом, ме-

тод как бы «поднимается» по координатам, используя на одной итерации значения координат, вычисленные на этой же итерации ранее, пока не дойдём до последней координаты. В этом и состоит схожесть методом решения СЛАУ. Ниже на рисунках приведены трёхмерные случаи, иллюстрирующие этот метод.

Ещё один, более универсальный метод оптимизации – **метод Нелдера – Мида**, также известный как **метод деформируемого многогранника** и **симплекс-метод** – итерационный метод безусловной оптимизации функции от нескольких переменных.

Суть метода заключается в последовательном перемещении и деформировании многогранника (симплекса) вокруг точки экстремума. Выбирается начальное приближение и на каждом шаге, по определённым правилам, изменяется многогранник (чаще всего изменяется одна из вершин, реже применяется растяжение или сжатие симплекса). Большим плюсом этого метода является то, что в нём не требуется каких-либо дополнительных вычислений. Нужно знать лишь вид функционала, но это естественным образом отражается на его сходимости. На рис. 2.15 иллюстрируется данный метод в трёхмерном случае.

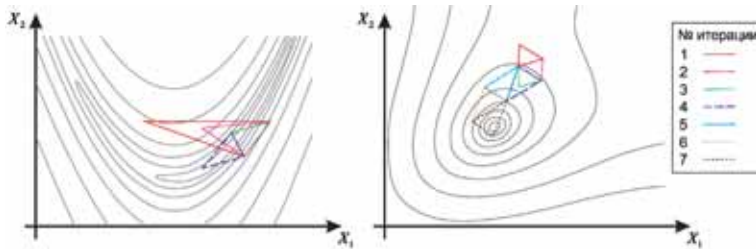


Рис. 2.15. Иллюстрация оптимизационного метода Нелдера – Мида

Ещё один наиболее распространённый метод – это **градиентный (наискорейший) спуск** – итерационный метод нахождения экстремума функционала с помощью движения вдоль градиента. Как и в методе Гаусса – Зейделя, где за направление выбираются поочередно координаты, после выбора направления движения (определения градиента) используется одномерная оптимизация. Чтобы перейти к следующей итерации, не

обязательно вычислять в данном направлении наилучшее значение, а достаточно найти значение, которое будет лучше предыдущего. Стоит заметить, что этот метод – один из наиболее простых в реализации методов и поэтому часто используется как вспомогательный. Таким образом, основная идея метода заключается в том, чтобы идти в направлении наискорейшего спуска, а это направление задаётся антиградиентом $-\nabla F(\mathbf{p})$ (в одномерном случае – это производная). Трёхмерный случай приведён на рис. 2.16, где хорошо видно, как итерации двигаются по градиенту и приближаются к экстремальной точке функционала.

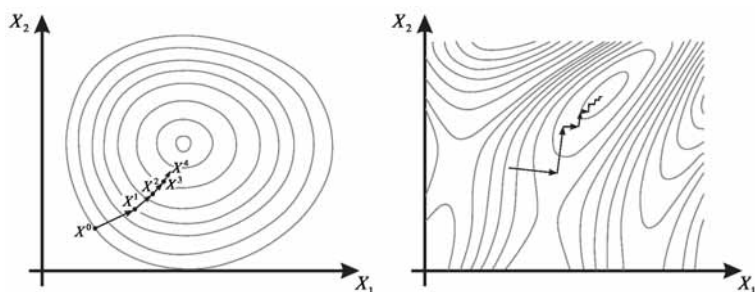


Рис. 2.16. Иллюстрация метода градиентного спуска

Все приведённые выше методы находят локальный экстремум (являются локальными) и могут «застрять» в одном из них. Если всё же требуется найти глобальный экстремум, в таких алгоритмах нужно пробовать выбирать другой начальный симплекс. Но существуют и глобальные методы, в частности это **методы Монте-Карло**. Они основаны на статистическом подходе и значение величины функционала принимается за случайные величины. По сути, происходит перебор значений функционала по определённым правилам, основанным на некоторых статистических, физических или других соображениях (предположениях). Нетрудно понять, что перебор значений в многомерном пространстве (пространстве параметров среды) требует огромных вычислительных и временных ресурсов.

Именно поэтому глобальные методы пока проигрывают детерминированным локальным методам, где зачастую поиск минимума занимает на порядки меньше времени и памяти.

Задачи для самостоятельного решения

35. Найти промежуточное значение $f(x)$ с помощью линейной интерполяции. Значения двух заданных узлов приведены в таблице.

i	x_i	$x_i = f(x_i)$
0	3,2	0,365
1	3,3	$f(x_i)$
2	3,4	0,234

36. Найти линейное приближение для функции $f(x) = x^2$ по трём точкам $x_0 = 0$; $x_1 = 1$; $x_2 = 2$.

37–38. Построить интерполянт методом канонического полинома, проходящий через точки, заданные в таблицах. Проверить решение в Excel, построив график найденного интерполянта и нанести заданные точки на координатную плоскость (воспользоваться шаблоном Ex3).

i	x_i	$x_i = f(x_i)$
0	0	-1
1	1	4
2	2	9

i	x_i	$x_i = f(x_i)$
0	0	0
1	1	3
2	2	26
3	-1	-1

39–40. Построить интерполяционный полином Лагранжа, проходящий через точки, заданные в таблицах задания 37–38. Построить графики коэффициентов Лагранжа, полином Лагранжа; нанести нули коэффициентов и точки интерполяции, как это показано на рис. 2.12 (воспользоваться шаблоном Ex3).

41. Аппроксимировать линейно данные, представленные в таблице. Воспользоваться формулами для линейной регрессии. Найти коэффициент корреляции и среднеквадратическое отклонение. С помощью Excel построить линию тренда и сравнить полученные результаты (воспользоваться шаблоном Ех3).

i	x_i	$x_i = f(x_i)$
0	0	-1,7
1	0,4	-0,3
2	0,8	1,5
3	1,2	4,4
4	1,6	6,5
5	2	8,3

42. Аппроксимировать линейно данные, представленные в таблице с помощью Excel. Построить линию тренда первой и второй степени. Сравнить достоверность аппроксимации в обоих случаях (воспользоваться шаблоном Ех4). Пользуясь Excel, вычислить среднеквадратическое отклонение в обоих случаях и сравнить их.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	0,9	4,2	5,9	7,2	7,6	7,4	6,9	6,2	4,5	2,4

2.4. Численное интегрирование

В ряде задач возникает необходимость вычисления определённого интеграла от некоторой непрерывной на отрезке $[a, b]$ функции $f(x)$.

$$I = \int_a^b f(x) dx.$$

Геометрический смысл интеграла заключается в том, что если $f(x) \geq 0$ на отрезке $[a, b]$, то интеграл I численно равен площади фигуры, ограниченной графиком функции, отрезком оси абсцисс и прямыми $x = a$, $x = b$ (см. рис. 2.17). Нетрудно понять, что если график функции лежит ниже оси абсцисс $f(x) < 0$,

то такая площадь будет приниматься с отрицательным знаком. Таким образом, вычисление интеграла равносильно вычислению площади криволинейной трапеции.

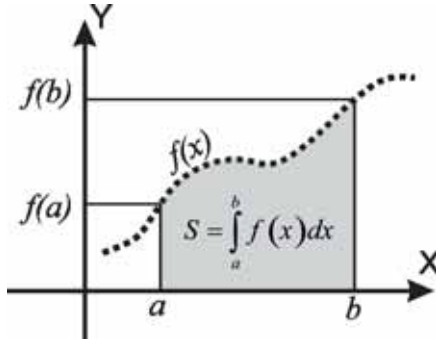


Рис. 2.17. Геометрический смысл интеграла

Методы численного интегрирования используются, когда первообразная функции $f(x)$ существует, но не представляется через известные элементарные и специальные функции.

Задача численного интегрирования может формулироваться в нескольких вариантах, но по сути все они между собой связаны.

В первом варианте исходная (подынтегральная) функция задана только в виде набора значений (как в задаче аппроксимации и интерполяции) $y_i = f(x_i)$ для конечного количества узлов $x_i \in [a, b]$.

Во втором варианте, который легко сводится к первому, известен алгоритм вычисления функции $f(x)$ для произвольного аргумента x . Этот вариант позволяет оперировать расположением узлов интегрирования $x_i \in [a, b]$, что часто позволяет сделать процесс численного интегрирования быстрее и точнее.

В третьем варианте численное интегрирование применяется, когда первообразная функции $f(x)$ выражается очень громоздко и вычислить точные значения не представляется возможным, но можно представить подынтегральное выражение с

помощью рядов. Такой подход иногда даёт даже более точные решения, нежели аналитическое вычисление сложных выражений, не говоря уже о временных затратах.

Как мы убедились, любая из ситуаций сводится к первому варианту, когда подынтегральная функция задана набором значений $y_i = f(x_i)$ для конечного количества узлов $x_i \in [a, b]$. Зная эти данные, мы можем использовать интерполяцию или аппроксимацию, которую, в частности, мы разобрали в п. 2.3. Это обычный подход к проблеме численного интегрирования – замена подынтегральной функции $f(x)$ на некоторую приближённую, которую можно проинтегрировать аналитически. Чаще всего приближённая функция выбирается в виде полинома. Найти интеграл от полинома не составит труда: первообразная полинома степени m – это полином степени $m+1$.

Изучая интерполяцию, мы убедились, что для произвольного набора точек $x_i, y_i, i = 0, 1, \dots, n$ существует интерполяционный полином Лагранжа $L_n(x)$. Если это выражение подставить в интеграл, то получим его приближённое значение

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx.$$

Как уже говорилось, найти определённый интеграл от многочлена не составит труда. Останется только применить теорему Ньютона – Лейбница, в результате в общем виде интеграл запишется в следующем виде:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i y_i.$$

Здесь $A_i, i = 0, 1, \dots, n$ – постоянные коэффициенты, полученные в результате интегрирования полинома Лагранжа и подстановки пределов. По сути, это определённые интегралы от коэффициентов Лагранжа, которые являются полиномами

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx.$$

Таким образом, для вычисления определённого интеграла требуется вычислить произведение значений функции y_i в узлах x_i на коэффициенты A_i

$$I = \sum_{i=0}^n A_i y_i.$$

Такая сумма называется квадратурной, выражение называется **приближённой квадратурной формулой** определённого интеграла, а коэффициенты A_i – **квадратурными**. Следовательно, основная трудность численного интегрирования сводится к нахождению этих **квадратурных коэффициентов** A_i , которые не зависят от вида интегрируемой функции $f(x)$. Они определяются только расположением узлов сетки.

Предложенный подход позволяет разрабатывать различные методы интегрирования, многие из которых носят имена первых учёных, которые применили подход (Ньютон – Котес, Гаусс и др.). Но одним из самых очевидных приближённых способов нахождения площади под графиком функции является простейшая формула площади прямоугольника.

2.4.1. Методы прямоугольников

Одним из простейших методов численного интегрирования является **метод прямоугольников**. Формулу данного метода можно получить, если подынтегральную функцию заменить на полином Лагранжа нулевого порядка, построенный по одной точке. В качестве этой точки можно выбрать крайние точки отрезка, либо его середину.

Но всё становится намного проще, если представить этот метод графически (см. рис. 2.18). Мы знаем, что интеграл – это площадь S под графиком функции $f(x)$ (см. рис. 2.18а). Самый простой способ найти приближённую площадь под графиком – это найти площадь прямоугольника, одна из сторон которого равна $b-a$. У нас есть множество точек на отрезке $[a, b]$, взяв ординату которых, мы сможем найти площадь прямоугольника, которую можно считать приближенно равной значению нашего

интеграла. Но из всего множества рассматривается три случая: **методы левых, средних и правых прямоугольников** (см. рис. 2.18б, в, г соответственно).

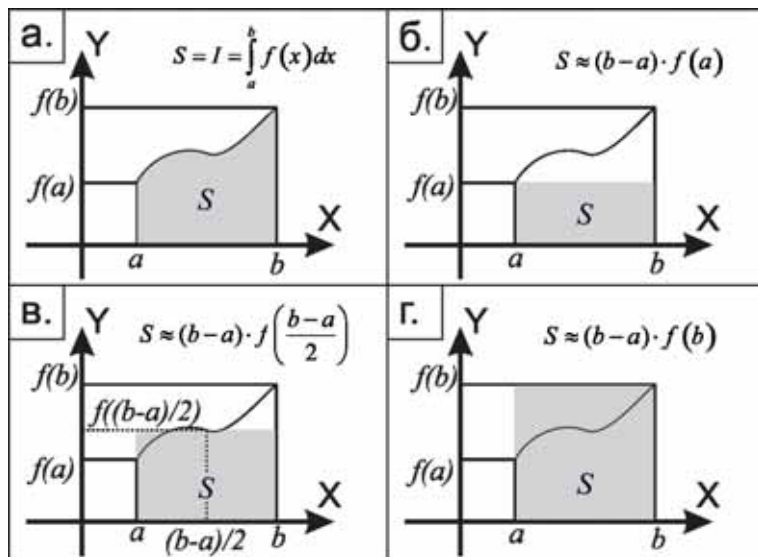


Рис. 2.18. Геометрическая интерпретация интегрирования методом прямоугольников без измельчения отрезка: а – точный интеграл; б – метод левых прямоугольников; в – метод средних прямоугольников; г – метод правых прямоугольников

Итак, если мы возьмём в качестве второй стороны прямоугольника ординату $f(a)$ левого края отрезка, то и **метод** будет **левых прямоугольников** (см. рис. 2.18б): $I \approx f(a) \cdot (b - a)$. Если найти середину отрезка $[a, b]$, которая равна $\frac{b-a}{2}$, в этой точке вычислить значение функции $f\left(\frac{b-a}{2}\right)$. Тогда это значение и будет второй стороной **метода средних прямоугольников** (см. рис. 2.18в): $I \approx f\left(\frac{b-a}{2}\right) \cdot (b - a)$. По такой же логике записывается формула для **метода правых прямоугольников** (см. рис. 2.18г), где за вторую сторону прямоугольника берётся значение функции в точке правого края отрезка $f(b)$: $I \approx f(b) \cdot (b - a)$.

Стоит сказать, что точность метода прямоугольников очень низкая. Но тем не менее, если разбить отрезок на n отрезков, и на каждом из них применить приведённые формулы, то и численное решение будет приближаться к точному по мере увеличения количества разбиений (см. рис. 2.19). Чаще всего применяется равномерное разбиение и тогда расстояние (разность) между соседними узлами будет одинаковое. Его обычно обозначают как $h = x_{i+1} - x_i, i = 0, 1, \dots, n$.

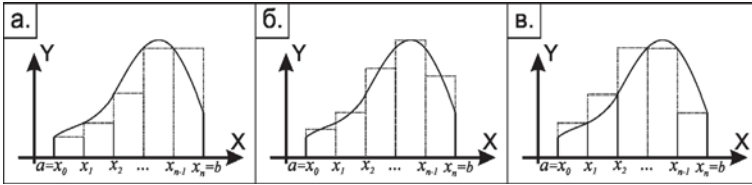


Рис. 2.19. Интегрирование методом прямоугольников при разбиении отрезка интегрирования на n отрезков: а – метод левых прямоугольников; б – метод средних прямоугольников; в – метод правых прямоугольников

В случае разбиения отрезка на n частей приведённые выше формулы применяются на каждом из этих элементарных отрезков между двумя соседними узлами, а соответствующая сумма будет давать приближённое значение искомого интеграла. В результате получаются **квадратурные формулы метода прямоугольников**

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \cdot (x_{i+1} - x_i) = h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \text{ – левые прямоугольники;}$$

$$I \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot (x_i - x_{i-1}) = h \cdot \sum_{i=1}^n f(x_i) \text{ – правые;}$$

$$I \approx \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) \cdot (x_{i+1} - x_i) = \sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right) \cdot (x_i - x_{i-1})$$

– средние.

$$= h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) = h \cdot \sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

Нетрудно заметить, что из-за нарушения симметрии в формулах правых и левых прямоугольников их погрешность больше, чем в методе средних прямоугольников. Но метод средних

прямоугольников в большинстве прикладных задач не даёт требуемой точности. Это расплата за простоту этого алгоритма. Ряд методов, которые позволяют вычислять интегралы более точно, приведены ниже.

2.4.2. Методы Ньютона – Котеса: формула трапеций. Метод Симпсона

Как мы уже показали, численные значения квадратурных коэффициентов A_i , $i = 0, 1, \dots, n$ определяются положением узлов сетки интегрирования x_i , $i = 0, 1, \dots, n$. Выбирая узлы различными способами, мы будем получать разные наборы A_i .

Как и раньше, предполагаем, что мы знаем (можем вычислить) значение функции $y_i = f(x_i)$ в узлах x_i , $i = 0, 1, \dots, n$. Будем рассматривать равномерное распределение узлов, т. е. расстояние между любыми соседними узлами будет равно постоянному значению $h = x_{i+1} - x_i$, $i = 0, 1, \dots, n-1$, которое можно выразить через концы отрезка интегрирования $h = \frac{b-a}{2}$. Тогда узлы можно вычислить $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$. Ясно, что $x_0 = a$, $x_n = b$.

Как мы уже говорили, один из очевидных способов получения квадратурных коэффициентов – это замена подынтегральной функции интерполяционным полиномом Лагранжа $L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x)y_i$. Тогда численный интеграл примет вид

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i y_i.$$

Теперь нам известно, что квадратурные коэффициенты можно вычислить по формуле $A = \int_a^b l_i(x)dx$, где $l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$. Простые алгебраические преобразования позволяют преобразовать квадратурные коэффициенты к виду $A_i = (b-a)H_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Здесь введены новые обозначения

$$H_i = \frac{(-1)^{n-i}}{n \cdot i! \cdot (n-i)!} \int_0^n \frac{q \cdot (q-1) \cdot \dots \cdot (q-n)}{q-i} dq; \quad q = \frac{x-a}{h}; \quad dq = \frac{dx}{h}.$$

Коэффициенты H_i называются **квадратурными коэффициентами Котеса**. Таким образом, для вычисления определённого интеграла следует применить следующую формулу:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \sum_{i=0}^n H_i y_i.$$

Это и есть **квадратурная формула Ньютона – Котеса n -го порядка**. Логично предположить, что чем выше порядок формулы, тем точнее будет вычислен интеграл, при условии одинакового разбиения интервала интегрирования.

Рассмотрим частные случаи формулы Ньютона – Котеса.

Простейший первый порядок ($n = 1$) формулы даёт нам 2 узла интегрирования на интервале $[a, b]$: $x_0 = a$ и $x_1 = b$. Подставляя в формулу для коэффициентов Котеса $n = 1$, а $i = 0, 1$, получим следующие коэффициенты:

$$H_0 = \frac{(-1)^{1-0}}{1 \cdot 0! \cdot (1-0)!} \int_0^1 \frac{q \cdot (q-1)}{q-0} dq = \frac{1}{2};$$

$$H_1 = \frac{(-1)^{1-1}}{1 \cdot 1! \cdot (1-1)!} \int_0^1 \frac{q \cdot (q-1)}{q-1} dq = \frac{1}{2}.$$

Подставляя найденные значения квадратурных коэффициентов Котеса в численный интеграл, получим **квадратурную формулу Ньютона – Котеса первого порядка**

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \sum_{i=0}^1 H_i y_i = (b-a) \cdot \frac{y_0 + y_1}{2} = h \cdot \frac{y_0 + y_1}{2}.$$

В данном случае величина шага h равна длине всего отрезка интегрирования $[a, b]$. В данном случае мы заменили подынтегральную функцию полиномом Лагранжа первой степени, т. е. линейной функцией. Поэтому приближённое значение интеграла, выраженное квадратурной формулой Ньютона – Котеса первого порядка, равно площади обычной трапеции с высотой h (см. рис. 2.20а).

Когда данный способ вычисления определённого интеграла используется на практике, то как и в случае с методом прямоугольников, отрезок интегрирования разбивается на n равных

частей (см. рис. 2.20б). Тогда $h = \frac{b-a}{2}$ и к каждому из таких отрезков можно применить формулу Ньютона – Котеса первого порядка. В результате получим следующую сумму:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \frac{y_0 + y_1}{2} + h \cdot \frac{y_1 + y_2}{2} + \dots + h \cdot \frac{y_{n-2} + y_{n-1}}{2} + h \cdot \frac{y_{n-1} + y_n}{2}.$$

Тогда

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right).$$

Последняя формула называется *формулой трапеций*.

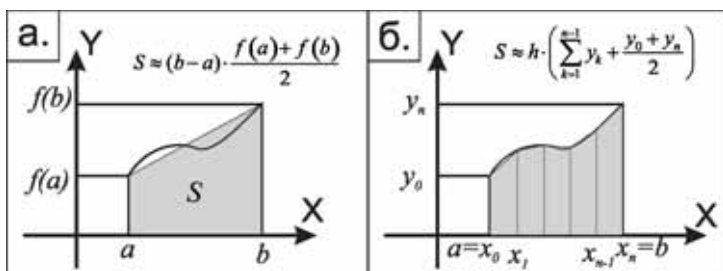


Рис. 2.20. Интегрирование методом трапеций: а – простейший случай, отрезок используется целиком; б – составной случай, отрезок разбит на n равных частей

Теперь рассмотрим случай, когда в формуле Ньютона – Котеса $n = 2$. Это значит, что диапазон интегрирования $[a, b]$ содержит три узла: $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$. В данном случае шаг интегрирования равен половине отрезка $[a, b]$: $h = \frac{b-a}{2}$.

Коэффициенты Котеса можно получить аналогично первому случаю (вывод формулы трапеций). Теперь $n = 2$, а $i = 0, 1, 2$.

$$H_0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_0^2 (q-1) \cdot (q-2) dq = \frac{1}{6};$$

$$H_1 = -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_0^2 q \cdot (q-2) dq = \frac{2}{3};$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_0^2 q \cdot (q-1) dq = \frac{1}{6}.$$

Тогда искомым интеграл примет вид

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \sum_{i=0}^2 H_i y_i = \frac{b-a}{6} (y_0 + 4y_1 + y_2) = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2).$$

Если в случае метода трапеций подынтегральная функция заменялась на линейный интерполянт, то в данном случае используется полином Лагранжа второго порядка $L_2(x)$ (квадратичная интерполяция), проходящий через заданные точки $x_i, y_i, i = 0, 1, 2$. Таким образом, значение численного интеграла будет соответствовать площади под интерполирующей параболой (см. рис. 2.21а).

На практике отрезок интегрирования, как и раньше, разбивается на n равных частей. В свою очередь, каждый из этих отрезков ещё разбивается пополам. Тогда можно записать количество узлов $N = 2n$ (см. рис. 2.21б) и вывести **формулу для метода Симпсона (квадратурная формула Ньютона – Котеса n -го порядка)**.

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} ((y_0 + 4y_1 + y_2) + (y_2 + 4y_3 + y_4) + \dots \\ &\quad \dots + (y_{N-4} + 4y_{N-3} + y_{N-2}) + (y_{N-2} + 4y_{N-1} + y_N)) = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \dots + 2y_{N-4} + 4y_{N-3} + 2y_{N-2} + 4y_{N-1} + y_N) = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-3} + y_{2n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-4} + y_{2n-2}) + y_N) = \\ &= \frac{h}{3} (y_0 + 4S_O + 2S_E + y_{2n}). \end{aligned}$$

Здесь $S_O = y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-1}$ – сумма значений функции в нечётных (odd) узлах, $S_E = y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-2}$ – сумма значений функции в чётных (even) узлах интегрирования.

Мы рассмотрели частные случаи квадратурных формул Ньютона – Котеса ($n = 1, 2$). Аналогичным способом можно вывести формулы для $n = 3$ – **квадратурная формула Ньютона** и $n = 4$ – **квадратурная формула Боде**.

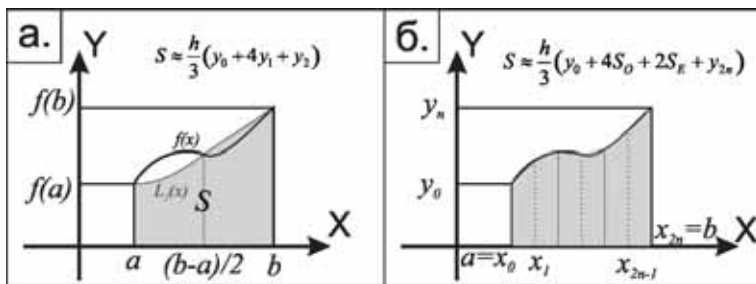


Рис. 2.21. Интегрирование методом Симпсона: а – простейший случай, отрезок используется целиком; б – составной случай, отрезок разбит на n равных частей

Все рассмотренные выше методы используют равномерное разбиение интервала интегрирования. Однако, далеко не всегда это приводит к положительному результату в плане точности и оптимальному использованию вычислительных ресурсов. При фиксированном количестве узлов можно добиться значительного уменьшения погрешности вычисления определённого интеграла, если отказаться от их равномерного расположения. Одним из таких подходов является квадратурная формула Гаусса. В следующем пункте будет дано краткое описание этого алгоритма.

2.4.3. Квадратурные формулы Гаусса и понятие погрешности при численном интегрировании

Как уже говорилось в случае квадратурных формул Гаусса узлы интегрирования x_i , $i = 1, \dots, n$ располагаются не равномерно, а выбираются по некоторому правилу. Для нахождения оптимального расположения узлов (которое обеспечит уменьшение погрешности численного интегрирования) интервал интегрирования $[a, b]$ общего вида сводится к стандартному интервалу $[-1, 1]$ с помощью линейной замены

$$x = \frac{a+b}{2} + t \frac{b-a}{2}.$$

Тогда исходный интеграл примет следующий вид:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b}{2} + t \frac{b-a}{2}\right) dt = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f(t) dt.$$

Соответственно и квадратурную формулу будем искать в новых переменных

$$\int_{-1}^1 f(t) dt \approx \sum_{i=1}^n A_i f(t_i).$$

Задача по нахождению оптимальных узлов сводится к поиску n узлов t_i на интервале $[-1, 1]$ и n коэффициентов A_i , чтобы квадратурная формула была точной для всех полиномов максимально большой степени. У нас $2n$ неизвестных величины t_i, A_i , поэтому максимальная степень полинома равна $2n-1$. Необходимым и достаточным условием выполнения этого условия нужно, чтобы оно было верным для $f(t) = 1, t, t^2, \dots, t^{2n-1}$. Или, что то же самое,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{2}{k+1}, k - \text{чётное} \\ 0, k - \text{нечётное} \end{array} \right\} = \int_{-1}^1 t^k dt = \sum_{i=1}^n A_i t_i^k.$$

Такое условие позволяет нам составить систему из $2n$ уравнений для искоемых $2n$ неизвестных t_i, A_i . Полученная система является нелинейной. Для её решения используются полиномы Лежандра, сведения о которых можно найти во множестве источников (читателю предоставляется шанс исследовать этот вопрос подробнее самостоятельно). В итоге оказывается, что в качестве узлов t_i следует взять точки нулей полиномов Лежандра степени n . Нули полиномов Лежандра различных степеней рассчитаны с большой точностью и сведены в специальные таблицы. Стоит отметить, что узлы и квадратурные коэффициенты в данном методе будут симметричны относительно центра $t=0$.

Теперь, когда нам известны узлы интегрирования t_i , полученная нелинейная система превращается в линейную относительно величин A_i . Для её решения можно применить любой из методов (в том числе и те, которые были разобраны в данном пособии в п. 2.2).

Вычислив значение узлов t_i и коэффициентов A_i для выбранного n , можно вернуться к исходной переменной интегрирования x и записать **квадратурную формулу Гаусса** в следующем виде:

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i y_i, \text{ где } y_i = f(x_i) \text{ и } x_i = \frac{a+b}{2} + t_i \frac{b-a}{2}.$$

Для примера получим квадратурную формулу Гаусса для $n = 2$ (два узла интегрирования). Приравняв полином Лежандра третьей степени к нулю, можно легко найти узлы интегрирования

$$P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1) = 0 \Rightarrow t_{1,2} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Для определения квадратурных коэффициентов A_i получаем систему

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2; \\ A_1 \frac{1}{\sqrt{3}} - A_2 \frac{1}{\sqrt{3}} = 0; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 = 1; \\ A_2 = 1. \end{cases}$$

Тогда, переходя к исходным переменным, получим **квадратурную формулу Гаусса второго порядка**

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i y_i = \\ &= \frac{b-a}{2} \left(f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{b-a}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{b-a}{2}\right) \right). \end{aligned}$$

Точность интегрирования методом Гаусса выше, чем в разобранных ранее методах, так же, как и степень её возрастания с увеличением числа узлов. Ещё одним плюсом этого метода являются заранее известные узлы и квадратурные коэффициенты, которые при больших порядках формул можно рассчитать один раз и использовать в дальнейшем. Существуют таблицы узлов и квадратурных коэффициентов Гаусса.

Понятие точности интегрирования любым из численных методов можно свести к погрешности квадратурной формулы, которая в свою очередь аналитически определяется остаточным членом, равным разности точного значения определённого интеграла и квадратурной суммы

$$R = \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=0}^n A_i y_i.$$

Но не всё так просто, ведь точное значение интеграла неизвестно. Поэтому приходится довольствоваться значениями подинтегральной функции в известных точках $y_i = f(x_i)$. За погрешность численного интегрирования с помощью квадратурных формул принимают численное абсолютное значение остаточного члена R или его оценку сверху. В данном пособии мы не будем подробно разбирать такие оценки. Приведём лишь пример, который иллюстрирует точность разобранных квадратурных формул численного интегрирования. Рассмотрим функцию ошибок $erf(x)$ которая задаётся следующим интегралом:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

Мы будем искать значение функции при $x = 1$ тремя способами: по двухточечной формуле трапеции, по трёхточечной формуле Симпсона и по двухточечной формуле Гаусса. При этом будем использовать целый отрезок, не разбивая его на части. Получим:

Для формулы трапеций

$$I_T = \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \cdot \frac{y_0 + y_1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow I_T = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} (1-0) \frac{e^{-0} + e^{-1}}{2} = 0,7717433\dots$$

Для формулы Симпсона

$$I_S = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)}{6} \cdot (y_0 + 4y_1 + y_2) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow I_S = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{(1-0) e^{-0} + 4e^{-\frac{1}{4}} + e^{-1}}{6} = 0,8431028\dots$$

Для формулы Гаусса

$$I_G = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \left(f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{b-a}{2}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{b-a}{2}\right) \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow I_G = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1-0}{2} \left(e^{-\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^2} + e^{-\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^2} \right) = 0,8424419\dots$$

Точный расчёт значения функции ошибок в точке $x = 1$ проводится с помощью специального ряда и даёт значение $0,84270079\dots$ Сравнение результатов показывает, что самая точная формула – в методе Гаусса, а худшая – в методе трапеций. Как уже говорилось, один из способов повышения точности численного интегрирования – это дробление отрезка. Но тем не менее, точность каждого из методов будет неизменной.

Рассмотренные методы численного интегрирования – это лишь часть большого раздела численных методов. Как стало понятно, для получения квадратур годятся любые интерполянты подынтегральной функции, в том числе и сплайны. Ещё один подход (метод Монте-Карло) основан на статистическом подходе. Также, помимо определённых одномерных интегралов, которые разобраны здесь, существуют методы вычисления многомерных и несобственных интегралов, которые разбираются в более специализированных курсах [2; 3].

Задачи для самостоятельного решения

43. Вычислить численное значение интеграла с помощью формул прямоугольников, трапеций, Симпсона, Гаусса по 2 узлам интегрирования (без разбиения отрезка). Сравним с точным значением интеграла. Вычислить остаточные члены.

$$\begin{array}{llll} \text{а) } \int_0^2 (3x+1)dx; & \text{б) } \int_0^2 (x^2-1)dx; & \text{в) } \int_1^2 \frac{x^2}{2} dx; & \text{г) } \int_{\frac{\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} \cos dx; \\ \text{д) } \int_1^3 \frac{dx}{x^2}; & \text{е) } \int_{0,5}^{1,2} \frac{dx}{x+1}; & \text{ж) } \int_0^2 \sin x dx; & \text{з) } \int_{-0,5}^{1,3} \frac{dx}{\sqrt{x^2+1}}. \end{array}$$

44. Получить квадратурную формулу Гаусса третьего порядка (частный случай метода Гаусса при $n = 3$).

45. Использовать интегралы, приведённые в задании 43. Вычислить приближённое значение интеграла с помощью формул прямоугольников, трапеций, Симпсона, Гаусса по 3 узлам интегрирования (разбить отрезок интегрирования на 2 части). Сравнить с точным значением интеграла, сравнить с численным значением, полученным в задании 43. Вычислить остаточные члены.

46. Использовать интегралы, приведённые в задании 43. Вычислить приближённое значение интеграла с помощью формул прямоугольников, трапеций, Симпсона поочерёдно по 2, 3, 4, 8, 16 узлам интегрирования, используя шаблон Excel (Ex5). Сравним полученные результаты с точным значением интеграла. Вычислить остаточные члены.

2.5. Интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

Последней темой, которую мы разберём во второй главе, будет численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), которые входят практически в любое описание физических полей. Необходимость такого действия возникает в случае, когда нахождения решения ОДУ невозможно аналитически, а такие ситуации возникают на практике достаточно часто.

Мы будем рассматривать численное интегрирование ОДУ вида

$$y^{(n)}(x) = f(x, y, (x), y'(x), \dots, y^{(n-1)}(x)).$$

с заданным начальным условием $y(x_0) = y_0$. Порядком уравнения называется максимальный порядок n входящей в него производной. Известно, что это *задача Коши* – нахождение решения (интеграла) дифференциального уравнения, удовлетворяющего начальным условиям. Функции y и f могут быть заданы векторами.

Для дальнейшего рассмотрения существенным является тот факт, что любое ОДУ произвольной степени может быть

сведено к эквивалентной системе ОДУ первого порядка. Например, мы можем преобразовать систему ОДУ, состоящую из трёх ОДУ второго порядка, к системе шести ОДУ первого порядка. Исходя из этого факта, ограничимся разбором численных методов решения только ОДУ первого порядка. Как и раньше, для простоты, мы будем рассматривать только одномерный случай. Таким образом, наша задача будет формулироваться следующим образом:

$$y'(x) = f(x, y, (x)), y(x_0) = y_0.$$

Мы разбираем общий вид ОДУ. Стоит понимать, что существуют специальные случаи, которые требуют отдельного анализа. (Это относится не только к этому пункту, но и к любому пункту этой главы).

Все рассмотренные дальше методы используют последовательный (итерационный) расчёт значений $y(x)$, начиная с $y(x_0)$ затем $y(x_1 > x_0)$ и т. д. Эти алгоритмы относятся к одному из классов: методы, использующие разложение в ряд Тейлора и методы Рунге – Кутты.

Как и во всех численных методах, не стоит забывать об ошибках вычисления. В данном случае можно вычислить локальную ошибку (ошибка при переходе между соседними шагами) и глобальную ошибку (суммарная ошибка за все шаги). Последняя вычисляется с помощью аналитического решения уравнения $y(x)$ Тогда можно записать глобальную ошибку в точке x_n

$$E_n = y(x_n) - y_n,$$

здесь y_n – это численное решение в точке x_n . Мы будем касаться в данном курсе только глобальной ошибки. Но стоит учитывать, что помимо ошибки интегрирования существуют тесно связанные понятия точности (порядок) и устойчивости (ограниченность) метода. Каждому из этих направлений в математике принято уделять особое внимание.

2.5.1. Метод Эйлера, метод Рунге – Кутты

Перейдём непосредственно к численному решению задачи Коши

$$y'(x) = f(x, y, (x)), y(x_0) = y_0.$$

Будем рассматривать последовательность точек x_0, x_1, x_2, \dots , которые расположены равномерно с шагом интегрирования h , тогда

$$x_n = x_0 + nh.$$

Предположим также, что $y(x)$ является гладкой функцией и может быть разложена в ряд Тейлора

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \dots$$

Если мы оборвём представленный ряд Тейлора на некотором члене, то получим **метод численного интегрирования с использованием ряда Тейлора**. Рассмотрим простейший случай, когда ряд обрывается после второго члена разложения. Такая ситуация приведёт нас к **методу Эйлера**, который записывается в виде

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n = y_n + h \cdot f(x_n, y, (x_n)).$$

Если же отстраниться от ряда Тейлора, то геометрическая идея метода Эйлера (как и методов Рунге – Кутты) состоит в том, чтобы заменить фрагмент графика решения $y(x)$ ломаной линией. В методе Эйлера такая ломаная будет состоять из касательных к решению $y(x)$ (см. рис. 2.22), т. е. в каждом узле x_n мы можем найти уравнение касательной, угол которой нам задан условием $y'(x) = f(x_n, y, (x_n))$, и найти пересечение этой касательной с прямой, которая задаётся следующим узлом $x = x_{n+1}$. Это пересечение и будет значением следующего приближения численного решения:

$$y_{n+1} = y_n + (x_{n+1} - x_n) \cdot f(x_n, y(x_n)) = y_n + hf(x_n, y_n).$$

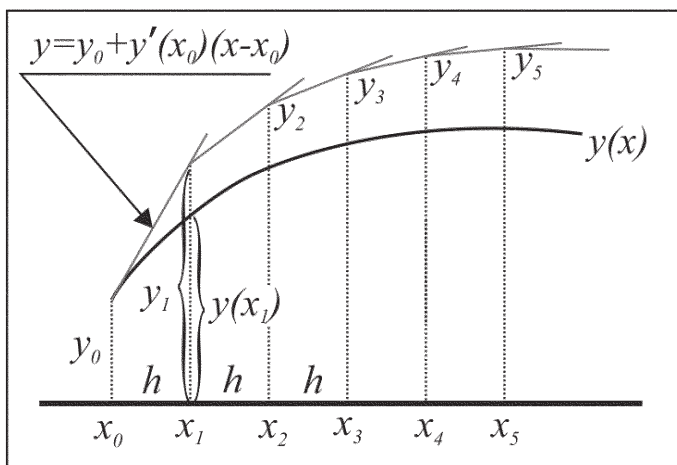


Рис. 2.22. Геометрическая интерпретация метода Эйлера

Разберём пример численного решения задачи Коши методом Эйлера. Дана следующая задача Коши:

$$y'(x) = -2xy^2, y(0) = 1.$$

Известно, что точное решение для данной задачи задаётся следующей функцией:

$$y(x) = \frac{1}{1+x^2}.$$

Нам необходимо найти численное решение ОДУ в точке $x = 2$, используя в расчётах шаг интегрирования $h = 0,5$, и вычислить глобальную ошибку.

$$x_0 = 0; y_0 = 1;$$

$$x_1 = 0,5; y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 1 + 0,5(-2 \cdot 0 \cdot 1^2) = 1;$$

$$x_2 = 1; y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1, y_1) = 1 + 0,5(-2 \cdot 0,5 \cdot 1^2) = 0,5;$$

$$x_3 = 1,5; y_3 = y_2 + h \cdot f(x_2, y_2) = 1 + 0,5(-2 \cdot 1 \cdot 0,5^2) = 0,75;$$

$$x_4 = 2; y_4 = y_3 + h \cdot f(x_3, y_3) = 1 + 0,5(-2 \cdot 1,5 \cdot 0,75^2) = 0,15625.$$

Точное решение в точке $x = 2$ можно вычислить $y(2) = 0,2$. После этого мы можем найти глобальную ошибку $E_4 = 0,04375$.

Таким образом можно вычислить численное значение решения ОДУ в заданной точке для любого шага интегрирования. Причём логично предположить, что чем мельче шаг, тем точнее будет вычисленное решение.

Метод Эйлера является простейшим методом решения ОДУ. Это влечёт за собой невысокую точность и вычислительную неустойчивость метода. Поэтому этот метод редко применяется на практике, однако он породил множество модификаций и собственно всё направление численных методов решения ОДУ. Одним из улучшений является *модифицированный метод Эйлера с пересчётом*. Его суть в том, что сначала находят так называемое «грубое приближение» по известной формуле (прогноз-предиктор)

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n).$$

А затем уже получают тоже приближённое, но более точное значение (коррекция-корректор)

$$y_{n+1} = y_n + h \frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})}{2}.$$

Фактически пересчёт позволяет учесть, хоть и приблизительно, изменение производной, так как учитываются её значения в начале и в конце шага, а затем берётся их среднее (см. рис. 2.23). Модифицированный метод Эйлера с пересчётом имеет более высокий порядок точности, однако для его реализации необходимо дважды на каждом шаге вычислять $f(x, y)$. Этот метод представляет собой разновидность методов Рунге – Кутты (предиктор-корректор).

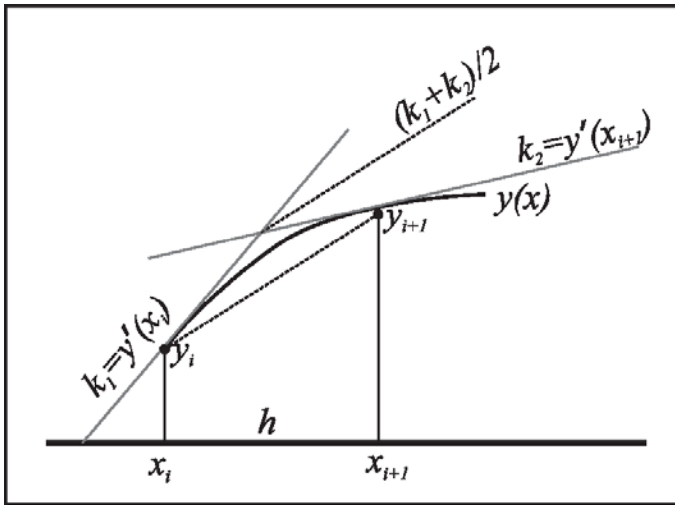


Рис. 2.23. Геометрическая интерпретация модифицированного метода Эйлера с пересчётом

Методы Рунге – Кутты были разработаны, чтобы получить ещё большую точность, чем модификации и совершенствования метода Эйлера. Но при этом в отличие от методов, использующих разложение в ряд Тейлора, хотелось исключить вычисление производных высших порядков. Это достигается за счёт включения дополнительных точек между узлами расчётной сетки и подбора коэффициентов α_i , β_{ij} , γ_i специальным образом так, чтобы метод максимально совпадал с разложением в ряд Тейлора истинного решения уравнения. В общем виде метод Рунге – Кутты m -го порядка определяется так:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_n, y_n); \\
 k_2 &= hf(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21} k_1); \\
 k_3 &= hf(x_n + \alpha_3 h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2); \\
 &\dots \dots \\
 k_m &= hf(x_n + \alpha_m h, y_n + \beta_{m1} k_1 + \beta_{m2} k_2 + \dots + \beta_{mm-1} k_{m-1}); \\
 y_{n+1} &= y_n + \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2 + \dots + \gamma_m k_m.
 \end{aligned}$$

Представим несколько частных случаев метода Рунге – Кутты:

Метод Рунге – Кутты первого порядка $m = 1$:

$$k_1 = hf(x_n, y_n);$$

$$y_{n+1} = y_n + k_1.$$

Метод Рунге – Кутты второго порядка $m = 2$:

$$k_1 = hf(x_n, y_n);$$

$$k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1);$$

$$y_{n+1} = y_n + 1/2k_1 + 1/2k_2.$$

Метод Рунге – Кутты четвёртого порядка $m = 4$:

$$k_1 = hf(x_n, y_n);$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right);$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right);$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3);$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).$$

Можно заметить, что метод Рунге – Кутты первого порядка совпадает с уже рассмотренным методом Эйлера, и второй порядок – с модифицированным методом Эйлера с пересчётом. Таким образом, эти методы являются частными случаями более общего метода Рунге – Кутты. Наиболее практичной и распространённой является схема Рунге – Кутты четвёртого порядка.

Нетрудно догадаться, что существуют и более сложные схемы численного интегрирования ОДУ. Это касается каждого пункта этой главы.

Задачи для самостоятельного решения

47. Найти численное решение задачи Коши в указанной точке методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера и методом Рунге – Кутты четвёртого порядка, разбивая отрезок

интегрирования на 4, 8 и 16 частей. Вычислить глобальную ошибку E_n . Провести сравнительный анализ точности трёх методов (воспользоваться шаблоном Ex6):

а) $y'(x) = -2xy^2$, $y(0) = 1$; точное решение $y(x) = \frac{1}{1+x^2} y(2) - ?$

б) $y'(x) = \frac{y}{x} + x^2$, $y(1) = 1$; точное решение $y(x) = \frac{x}{2}(x^2 + 1)$.
 $y(3) - ?$

в) $y'(x) = x + \frac{y}{x}$, $y(1) = 0$; точное решение $y(x) = x^2 - x$. $y(1,5) - ?$

г) $y'(x) = -\frac{xy}{1+x^2}$, $y(0) = 1$; точное решение $y(x) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$.
 $y(0,5) - ?$

д) $y'(x) = -y \cos x + \cos x \sin x$, $y(0) = -1$; точное решение $y(x) = \sin x - 1$. $y(0,5) - ?$

е) $y'(x) = \frac{1}{\cos x} - \frac{\sin x}{\cos x} y$, $y(0) = 0$; точное решение $y(x) = \sin x$.
 $y(1) - ?$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассмотрели основные, простые, как с точки зрения восприятия, так и с точки зрения вычислений, численные методы. Таким образом, мы изучили основы теории численных вычислений. Теперь, согласно методологии математического моделирования академика А. А. Самарского «модель – алгоритм – программа», у нас имеются все ресурсы и знания для программной реализации модели и алгоритма на компьютере.

Геофизикам-интерпретаторам эти знания необходимы, по большей части, не для написания программного обеспечения, а для понимания сути уже созданных программ, в которых используются численные методы. То есть, мы можем переходить к практике моделирования физических полей различных геофизических методов, что мы и будем делать на практических занятиях по курсу «Математическое моделирование в разведочной геофизике».

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Авдюшев, В. А. Учебно-методический комплекс «Численные методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений» [Электронный ресурс] / В. А. Авдюшев. – Режим доступа: <http://www.astro.tsu.ru/ChIntODY/> (дата обращения 20.10.2017).
2. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – Москва: Бином, 2003.
3. Березин, И. С. Методы вычислений / И. С. Березин, Н. П. Жидков. – Москва: Физматгиз, 1966.
4. Вахромеев, Г. С. Моделирование в разведочной геофизике / Г. С. Вахромеев, А. Ю. Давыденко. – Москва: Недра, 1987. – 192 с.
5. Введение в математическое моделирование: учеб. пособие / В. Н. Ашихмин [и др.]; под ред. П. В. Трусова. – Москва: Логос, 2004. – 440 с.
6. Горная энциклопедия [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.mining-enc.ru/r/razvedochnaya-geofizika/> (дата обращения: 20.10.2017).
7. Задков, В. Н. Компьютерная физика [Электронный ресурс] / В. Н. Задков, С. А. Шленов. – Режим доступа: <http://www.qilab.phys.msu.ru/people/zadkov/zadkov-teaching.shtml> (дата обращения: 22.07.2017).
8. Зайцев, В. Ф. Математические модели в точных и гуманитарных науках / В. Ф. Зайцев. – Санкт-Петербург: Книжный дом, 2006. – 112 с.
9. Иванова, Т. В. Численные методы в оптике: учеб. пособие / Т. В. Иванова. – Санкт-Петербург: Ун-т ИТМО, 2017. – 84 с.
10. Лаборатория Геоэлектрики [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.geoelectriclab.com/ZabSU/MMvG> (дата обращения: 30.04.2017).
11. Мышкис, А. Д. Элементы теории математических моделей / А. Д. Мышкис. – 3-е изд., испр. – Москва: КомКнига, 2007. – 192 с.

12. Пирумов, У. Г. Численные методы: учеб. пособие / У. Г. Пирумов. – Москва: Изд-во МАИ, 1998. – 188 с.

13. Распопов, В. Е. Лекции по курсу «Численные методы» / В. Е. Распопов, М. М. Клунникова. – Красноярск: Сибирский федер. ун-т, 2007. – 186 с.

14. Фадеев, М. А. Численные методы: учеб. пособие [Электронный ресурс] / М. А. Фадеев, К. А. Марков. – Режим доступа: <http://www.unn.ru/books/resources.html> (дата обращения: 20.10.2017).

Учебное издание

Шеин Александр Николаевич
Потанов Владимир Владимирович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В РАЗВЕДОЧНОЙ ГЕОФИЗИКЕ**

Редактор В. К. Демиденко
Вёрстка Г. А. Зенковой

Подписано в печать 30.11.17.
Форм. бум. 60×84/16.
Печать цифровая. Гарнитура Times New Roman.
Усл. печ. л. 7,3. Уч.-изд. л. 4,9.
Тираж 100 экз. (1-й завод 1–35 экз.) Заказ № 17245.

ФГБОУ ВО «Забайкальский государственный университет»
672039, г. Чита, ул. Александрово-Заводская, 30