Ю. И. Рыжиков

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

- Традиционные разделы вычислительной математики, усиленные новыми подходами
- Методология математического моделирования
- Способы эффективного программирования
- Приемы и примеры реализации типовых вычислительных алгоритмов
- Работа с матрицами специальной структуры
- Задачи оптимизации
- Математические библиотеки и пакеты научных подпрограмм

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

bhv

Ю. И. Рыжиков

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Рекомендовано учебно-методическим объединением вузов по университетскому политехническому образованию в качестве учебного пособия для студентов, обучающихся по направлению 230100 — «Информатика и вычислительная техника»

Санкт-Петербург
2007

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.193я73
Р94

Рыжиков Ю. И.

Р94 Вычислительные методы. — СПб.: БХВ-Петербург, 2007. — 400 с.: ил.

ISBN 978-5-9775-0137-8

Книга написана инженером специально для инженеров и посвящена основам решения инженерных задач с акцентом на программную реализацию методов вычислительной математики. Включает в себя постановку задачи математического моделирования, описание вычислительных алгоритмов линейной алгебры, приближения функций, численного дифференцирования и интегрирования. Приводятся приемы эффективного программирования, описаны математические пакеты и библиотеки. Текст книги сопровождается программами или их фрагментами, таблицами и графиками.

Для студентов технических вузов, аспирантов и инженеров

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.193я73

Группа подготовки издания:

Главный редактор	*Екатерина Кондукова*
Зам. главного редактора	*Татьяна Лапина*
Зав. редакцией	*Григорий Добин*
Компьютерная верстка	*Юрия Рыжикова*
Корректор	*Людмила Минина*
Дизайн обложки	*Инны Тачиной*
Зав. производством	*Николай Тверских*

Рецензенты:

П. В. Герасименко, заслуженный деятель науки РФ, доктор технических наук, профессор Санкт-Петербургского университета путей сообщения

А. Я. Перельман, доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургской лесотехнической академии

Лицензия ИД № 02429 от 24.07.00. Подписано в печать 16.07.07.
Формат 70×100 1/16. Печать офсетная. Усл. печ. л. 32,25.
Тираж 2000 экз. Заказ №
"БХВ-Петербург", 194354, Санкт-Петербург, ул. Есенина, 5Б.

Санитарно-эпидемиологическое заключение на продукцию
№ 77.99.02.953.Д.006421.11.04 от 11.11.2004 г. выдано Федеральной службой по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека.

Отпечатано с готовых диапозитивов
в ОАО "Техническая книга"
190005, Санкт-Петербург, Измайловский пр., 29

ISBN 978-5-9775-0137-8

Оглавление

Введение

«Мы знаем что-то, если можем это запрограммировать».
А. П. Ершов

0.1. Потребности в математике

Стремительный прогресс научных знаний и техники XX века — освобождение внутриядерной энергии, освоение космического пространства, раскрытие тайн наследственности и т. д. — не только является воплощением в жизнь самых смелых фантазий, но и обгоняет их. Объем научных исследований в последнее время удваивается каждые 10 лет, а количество ныне живущих работников науки примерно равно числу ученых за всю историю человечества. Как старые, так и возникшие уже в XX столетии новые отрасли знания бурно развиваются и постоянно рождаются все новые: кибернетика, квантовая теория поля, биофизика, космическая биология, механика космического полета, формальная генетика, структурная лингвистика и т. д. Развиваются геофизические методы поиска полезных ископаемых, мерзлотоведение.

Интенсивно ведется расшифровка структуры вещества по экспериментальной информации, полученной методами рентгенографии, электронографии и нейтронографии. Решаются стереохимические задачи, ведутся работы по моделированию химического анализа и синтеза. Изучается структура белков, динамика популяций и биоценозов. Этот перечень можно продолжать практически бесконечно.

Основной и наиболее характерной особенностью современной науки является растущая *математизация* ее. Примером могут служить перечисленные выше новые дисциплины, а также проникновение математики в экономику, медицину, педагогику, психологию, лингвистику, теорию искусства и т. п. Все эти факты подтверждают известное положение: «Наука только тогда достигает совершенства, когда ей удается пользоваться математикой».

Основой столь широкого использования математических методов является соответствие между свойствами физических и абстрактных математических объектов. Математически описав количественные связи между элементами некоторого явления, исследователь получает его абстрактную модель. Формальный анализ модели позволяет установить законы изменения переменных и другие необходимые свойства математического решения, а затем с их помощью получить новое знание об исходном физическом объекте. Математическое моделирование облегчается тем, что одни и те же зависимости могут описывать явления различной физической природы (например, изменение тока в RC-контуре, колебания сжатой пружины и математического маятника).

0.2. Специфика современного этапа

0.2.1. Состояние математики

Математика древнего мира имела дело со сравнительно простыми (с современной точки зрения) задачами — главным образом из области измерения площадей и объемов, а также астрономии. Математический аппарат, возникший сначала с развитием алгебры, а затем дифференциального и интегрального исчисления, дал в руки естествоиспытателей и инженеров мощное средство моделирования действительности, без которого не было бы современной науки и техники. Однако использование этого аппарата далеко не всегда приводило к простым и изящным формулам. Уже давно выяснилось, что:

- многие неопределенные интегралы не могут быть выражены через элементарные функции;
- многие уравнения, в частности — уравнения вида

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \ldots + a_{n-1}x + a_n = 0$$

  при $n \geq 5$, в общем случае неразрешимы в радикалах, и точные значения их корней не могут быть получены выполнением конечного числа элементарных действий;

- лишь редкие дифференциальные уравнения имеют решения в элементарных функциях.

Однако решение не обязательно должно иметь аналитический вид. В конце концов для практики нужны числовые результаты при конкретных наборах исходных данных, причем эти результаты могут иметь некоторую погрешность. Следовательно, практическим целям не хуже формул могут служить *алгоритмы* более общего вида, т. е. совокупности формальных предписаний, однозначно определяющих результат вычислений при заданном наборе исходных данных. Численные методы часто оказываются универсальнее аналитических. Так, формула

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

при достаточно большом n и надлежащем выборе весовых коэффициентов $\{A_i\}$ и узлов интегрирования $\{x_i\}$ может обеспечить любую наперед заданную точность для произвольной (достаточно гладкой) подынтегральной функции. Методы численного решения математических задач путем сведения их к последовательности арифметических операций и составляют предмет *вычислительной математики* (численного анализа).

Становление вычислительной математики происходило параллельно с развитием «чистой» математики, также связанной с именами Ньютона, Лейбница, Стирлинга, Бернулли, Эйлера, Лагранжа и др. Крупнейшую роль в ее развитии играли выдающиеся русские ученые П. Л. Чебышев и Н. И. Лобачевский. Первый в мире курс приближенных вычислений был прочитан акад. А. Н. Крыловым, которому принадлежат и важные научные результаты в этой области. Большой вклад в вычислительную математику внесли и советские ученые.

Математика наших дней интенсивно развивается под действием как внутренних, так и внешних стимулов. Внутренние стимулы двигают главным образом чистую математику в направлениях логического завершения, обобщения и взаимопроникновения ранее созданных теорий — без непосредственной связи с приложениями. Внутриматематическая ценность этих работ несомненна: они способствуют развитию математики в целом. «Математика — это большой город, чьи предместья не перестают разрастаться несколько хаотическим образом на окружающем его пространстве, в то время как центр периодически перестраивается, следуя каждый раз все более ясному плану и стремясь ко все более и более величественному расположению, в то время как старые кварталы с их лабиринтом переулков сносятся для того, чтобы проложить к окраине улицы все более широкие, все более удобные» (Н. Бурбаки, [61, с. 18]). Однако «экспорт» новейших идей предельной общности в приложения и особенно в математическое образование прикладников должен осуществляться с крайней осторожностью. Как отмечено в [11], сохраняется тенденция «обурбачивания» все новых разделов математики, в частности вычислительной. Отойдя от традиций Эйлера и других математиков «золотого периода», математики теоретико-множественного направления *перестали вычислять*. Утверждения о решении носят «экзистенциальный» характер — без указания пути к нему. Асимптотические оценки даются без указания константы или с неимоверным завышением ее. Как в России (ранее — в СССР), так и на Западе «учителя, употреблявшие при каждом удобном случае слово "множество", считают себя пионерами педагогических изысканий» [94, с. 10].

С другой стороны, математизация новых разделов науки и потребности практики неизбежно оказывают обратное влияние на математику, прежде всего прикладную. В частности, появились новые методы, приспособленные для решения задач большой размерности, некорректных, плохо обусловленных, связанных с «неудобными» комбинациями параметров («жесткие» системы дифференциальных уравнений), многомерной оптимизации, проблем машинной графики (сплайны). Прикладные исследования имеют непосредственную отдачу; это усиливает доверие общества к математике, расширяет понимание ее проблем и способствует вложению средств в ее развитие.

0.2.2. Развитие ЭВМ

В наши дни сколько-нибудь серьезные вычисления выполняются только на вычислительных машинах — под управлением реализующих вычислительные методы программ. Рост технических характеристик ЭВМ обгоняет самую бурную фантазию. Менее чем за 50 лет быстродействие процессора возросло на 10 порядков, тогда как скорость передвижения человека (от пешехода до космонавта) — лишь в 5000 раз [10]. Не менее важно и увеличение доступных объемов оперативной памяти — автор никогда не забудет свои мучительные попытки уложить программу и данные в 4000 слов М-20 в начале 1960-х гг. Наконец, возросла надежность вычислительных машин, средние интервалы между отказами которых измеряются уже не единицами часов, а годами. Появились векторные вычислители, эффективно реализующие накопление скалярных произведений и иные матричные операции, мультипроцессорные и многомашинные вычислительные комплексы.

В результате некоторые аспекты вычислительной практики для типовых случаев радикально трансформировались. Практически потеряли смысл вопросы о разрядности промежуточных вычислений и оперативном контроле их правильности; уменьшилась важность минимизации объема вычислений и требуемой оперативной памяти. Тем не менее в связи с вышеперечисленными тенденциями в изменении решаемых задач сохраняют актуальность проблемы работы с упакованными матрицами специальной структуры, ускорения сходимости итерационных процессов решения уравнений и оптимизации. Возрос интерес к *распределенным* вычислениям и численным методам, приспособленным для них.

0.2.3. Программирование вычислений

Хорошо известна стандартная последовательность действий пользователя ЭВМ:

1) содержательная постановка задачи;
2) математическая формулировка ее;
3) сбор исходных данных;
4) дискретизация задачи (выбор численного метода);
5) программирование;
6) отладка программы;
7) рабочий счет;
8) обработка результатов.

Однако их содержание претерпело заметные изменения. Расширился арсенал численных методов; изменились критерии предпочтительности (к примеру, задачи нелинейной оптимизации сейчас решаются преимущественно методами поиска — без использования теоремы Куна—Таккера).

Опыт программирования показывает, что качество программы в решающей степени зависит от выбранного алгоритма и в значительно меньшей — от примененных приемов программирования. Например, решение системы из 10 линейных алгебраических уравнений методом Гаусса требует примерно в 300 000 раз меньше арифметических операций, чем применение известных из общего курса математики формул Крамера (в предположении, что каждый определитель вычисляется как сумма произведений по 10 множителей в каждом). Это объясняет, почему хороший программист должен знать вычислительную математику.

Появилось множество языков программирования, в той или иной степени пригодных для описания численных алгоритмов, в связи с чем возникла проблема выбора рабочего языка. Высший приоритет получили ясность и логическая простота программы.

Многие типовые алгоритмы вычислительной математики реализованы в составе библиотек соответствующих систем программирования или пакетов прикладных программ. Все такие пакеты обеспечивают матричные вычисления с помощью *базисного набора* алгоритмов линейной алгебры — в частности, представления матриц общего вида в виде произведения специальных. Для интерполяции они используют эрмитовы кубические кривые и кривые Безье, для вычисления определенных интегралов рекомендуют адаптивные алгоритмы или формулы Кронрода.

В численных методах всегда имеется бездна ловушек, о которых пользователь должен быть предупрежден — чтобы он мог правильно диагностировать признаки «численного нездоровья» [37, с. 15]. Подпрограммы пакетов проверяют приемлемость входных параметров и выдают предупреждающие сообщения. Универсальные или применимые к очень широкому кругу задач процедуры, как правило, имеют низкую точность и медленную сходимость к точным значениям. Это требует определенного уровня понимания используемых методов.

Созданы интегрированные среды для решения частных математических задач, в том числе в символьной форме (Mathematica, Maple, MathCAD, MatLab, Derive, Scientific WorkPlace и др.). Предложены новые технологии программирования (в частности, объектно-ориентированное), имеющие целью уменьшить трудоемкость разработки и количество ошибок в программах.

0.2.4. «Вычислительные кадры»

Выше уже отмечался прогресс, достигнутый в последние десятилетия по всему фронту компьютерных наук (Computer Science). К сожалению, этого нельзя сказать о компьютерном (фактически — обо всем) образовании. Общей тенденцией (со стороны как преподавателей, так и студентов) стало натаскивание на обеспечение сиюминутных потребностей: дай результат здесь и сейчас, не вникая в способ его получения. Это начинается еще в школе, выпускники которой в своей массе не умеют думать и панически боятся минимального умственного усилия[1].

Слабое знание математики основной массой пользователей определяет преобладающее использование самых примитивных методов. Приведем опубликованные на международной конференции по численному программному обеспечению статистические данные о Токийском университете: из 3094 случаев численного интегрирования в 118 применялся метод трапеций, в 2461 — Симпсона, в 411 — Гаусса и только в 104 — правило Ромберга. Таким образом, 80% пользователей не пошли дальше формул Симпсона. Ненамного лучше обстояло дело с линейной алгеброй: здесь 2/3 задач решались методом Гаусса.

Таблица 1. Решение систем линейных уравнений

Метод	Кратность
Гаусс (без выбора)	2200
Гаусс (с выбором)	2380
Гаусса—Жордана	31
LU-декомпозиция	1230
Холецкого	390
Наименьших квадратов	390
Всего	6621

Под выбором понимается выбор ведущего элемента.

Огромный вред принесла концепция «непрограммирующих» пользователей, породившая армию неспособных к самоусовершенствованию компьютеризованных дебилов. В том же русле находятся попытки *заменить* преподавание вычислительной математики решением задач в одной или нескольких из упомянутых математических сред.

0.3. Как учить вычислительной математике

Перечислим первоочередные требования к целевой установке, содержанию и методике обучения вычислительной математике (ВМ).

[1]Автор 40 лет преподает в инженерном вузе и постоянно наблюдает эту удручающую тенденцию.

1. Студент должен знать базовые понятия ВМ и их взаимные связи, идейные основы и расчетные схемы типовых алгоритмов, сравнительные достоинства и области предпочтительного применения последних, способы контроля правильности результатов, требования к программному продукту.

2. Знание алгоритмов должно проверяться *умением запрограммировать* указанный метод (см. эпиграф к Введению). Автор имел честь участвовать в заседании Санкт-Петербургского математического общества, которое постановило «мочить на месте» (В. В. Путин) преподавателей, заставляющих вручную обращать матрицы четвертого порядка.

3. Доводить результаты до числа, сравнивать альтернативные способы решения задачи (например, тип и порядок квадратурных формул) нужно с помощью программ или в математических средах. С работой в последних следует знакомить на *практических* занятиях.

0.4. О данной книге

Вычислительная математика (ВМ) — одна из немногих областей науки, по которой продолжается переиздание классики и выпуск новой литературы. Переиздания и книги, ориентированные на стандартный втузовский учебный план, как правило не учитывают обсуждавшиеся выше особенности современного этапа практики вычислений. Значительная часть литературы ориентирована на физико-математические специальности. Эти книги чрезмерно усложнены, перегружены доказательствами и уделяют явно недостаточное внимание реализации методов. Известно, как упорно боролся со «слишком чистыми математиками» Л. Д. Ландау, доказывая необходимость «считающих» методов.

Опасна и противоположная крайность — уклон в чисто рецептурную сторону «информационных технологий» и натаскивание студентов на работу с математическими пакетами без понимания сути, взаимосвязей, возможностей, ограничений и опять же — *реализации* используемых методов.

В связи с обоими равно непродуктивными «уклонами» хочется напомнить о давней и плодотворной традиции изучения ВМ и программирования в комплексе (*Мак-Кракен Д., Дорн У.* Программирование на Фортране. — М.: Мир, 1969). Такое объединение весьма ценно и для преподавания *программирования*, поскольку обеспечивает постановку реальных и содержательных задач.

Отметим, наконец, что необъятность проблемы, разнообразие специальностей и личного научного и педагогического опыта преподавателей вполне оправдывают — более того, требуют — существования *набора* учебников по ВМ.

Автор каждой книги по классическому направлению науки обязан сопоставить ее с аналогичными публикациями последних лет. Большинство новых или переизданных учебников [10, 15, 46, 88, 102] при всем уважении к научной квалификации их авторов ориентировано на студентов физико-математических специальностей и к знанию на таком уровне не подводит. Они перегружены длинными выкладками и обсуждением частностей. Стиль их написания соответствует давно прошедшим временам, когда в прикладном программировании четко разделялись функции программистов-кодировщиков и постановщиков задачи. Теперь (по крайней мере для студента и молодого специалиста) они совмещены, а серьезному программированию расчетных задач никто не учит. Из обсуждаемого списка только в [41, 44] приводятся примеры Паскаль-программ. Такие примеры обычно тривиальны и рациональным приемам программирования не учат. Книга С. В. Поршнева [76] заявленного права называться курсом лекций никак не заслуживает, поскольку примерно половина ее описывает работу с пакетом MatLab, т. е. посвящена технологии *практических занятий*, а уровень ее теоретической части становится ясным уже из написания фамилии классика (Koshi вместо Cauchy – с. 159). Книга [47] позиционирована как написанная по совету акад. А. А. Самарского для параллельного преподавания программирования и вычислительной математики (заметьте: *параллельного*, т. е. разными преподавателями, а не совмещенного).

В отличие от большинства учебников по численным методам, *эта книга* написана инженером специально для инженеров. Предлагаемый вариант учитывает вышеупомянутые особенности состояния теоретических основ ВМ, развития вычислительной техники, численного программного обеспечения и контингента обучаемых. Нашей целью было пояснить основные идеи математических методов и общие закономерности рассматриваемых явлений. Напротив, формальные доказательства, рассмотрение исключений и усложняющих факторов по возможности опущены. Основной целью было воспитать у студентов прикладную математическую культуру, развить необходимые эрудицию и интуицию в вопросах применения математики, а также логическое и алгоритмическое мышление. Хотелось бы убедить их в том, что машина, освобождая нас от многих обязанностей, не освобождает от трех: творчески мыслить, владеть математическим аппаратом и программировать.

О содержании книги достаточно ясное представление дает оглавление. Здесь мы лишь обратим внимание на вошедшие в нее «нетипичные» разделы: обзор современного Фортрана; многочисленные примеры фортрановских реализаций алгоритмов или их частей; фортрановские научные библиотеки; приемы рациональной организации вычислений многочленов, степенных рядов и непрерывных дробей, определенных интегралов; работу с разреженными матрицами регулярной структуры; решение некоторых редко обсуждаемых классов матричных уравнений.

В книгу не вошли вопросы решения краевых задач, дифференциальных уравнений в частных производных, теории оптимального управления, быстрого преобразования Фурье. На наш взгляд, в инженерных вузах эти проблемы слишком сильно окрашены конкретными приложениями, и их предпочтительно излагать в составе специальных дисциплин.

В раздел оптимизации включены только те методы нелинейного программирования, которые по своему математическому аппарату непосредственно примыкают к вычислительной математике. Соответственно, оставлены в стороне специфические проблемы линейного и динамического программирования и задачи на графах.

Дополнительные сведения по всем обсуждаемым (и оставшимся «за бортом») вопросам можно почерпнуть из источников, перечисленных в списке литературы.

В связи с «программистской» ориентацией учебника степень подробности числовых примеров не ориентирована на ручной счет. По той же причине целая часть числа отделяется от дробной *точкой*, а в роли разделителя мантиссы и экспоненциальной части используется привычное для пользователя ЭВМ «e». Все доказательства теорем завершаются знаком ▲.

Автор много сил затратил на попытки унификации обозначений, но успеха не достиг. В качестве примера возникших трудностей сошлемся на необходимость различения в многомерных задачах номера итерации и номера компоненты вектора. Перенос последней в верхний индекс вызывал постоянные затруднения из-за необходимости в показателях степени, указателях транспонирования и т. п. Другой проблемой явилось шрифтовое различение скаляров, векторов и матриц. Хотя набор векторов полужирным шрифтом весьма распространен, встречаются книги, где наряду с этим *векторная функция* набрана обычным шрифтом. Матрицы набираются то жирным шрифтом, то обычным, а в классической книге Ф. Р. Гантмахера шрифтовые выделения для векторов и матриц не используются вообще. Существует десяток разных обозначений для градиента. Разного рода надчеркивания, подчеркивания, тильды и «крышки» скорее затрудняют восприятие, чем помогают читателю. Кроме того, случайный пропуск одного из заявленных украшений может изменить смысл математического выражения. В связи с изложенным автор предпочел использовать опыт вузовских педагогов: лектор у доски не может пользоваться шрифтовыми выделениями в принципе, время на упомянутые украшения жалеет и обходится самыми простыми средствами, предварительно оговорив особенности ситуации.

В разных книгах при расчете скалярного произведения комплекснозначных векторов сопряженным берется то первый, то второй вектор. Индексация коэффициентов многочлена n-й степени даже в одной книге начинается то с нуля, то с n — в зависимости от решаемой задачи и в целях большей понятности происходящего. Буквой Δ обозначаются как погрешность, так и приращение переменной. Этот перечень можно продолжать бесконечно.

Автор не решился взять на себя ответственность за «наведение порядка» в ВМ (в частности, потому, что предлагать в этой сфере радикальные новшества значит потерять читателя вообще) и признает себя, но не только себя, повинным во всех перечисленных грехах.

Автор посвящает эту книгу светлой памяти своего учителя и соавтора по [92] доктора физико-математических наук профессора Х. Л. Смолицкого (1912–2003).

Глава 1. Содержание и средства математического моделирования

1.1. Математическое моделирование

Любая целенаправленная деятельность предполагает оценку результатов действий. Метод проб и ошибок в этом смысле всегда является наихудшим. Гораздо выгоднее (дешевле, быстрее, безопаснее) провести моделирование интересующего нас явления или процесса и принять требуемое решение (в науке — гипотезу) на основе анализа поведения *модели*. Необходимость в моделировании возникает также, если объект слишком велик (корабль) или мал (атом); удален от исследователя (галактика); недосягаем во времени (прошлое или будущее); дорог.

Основной целью моделирования является постановка над моделью экспериментов с последующей *интерпретацией* их результатов для моделируемой системы. Модель *концентрирует* в себе записанную на определенном языке (естественном, математическом, алгоритмическом) совокупность наших знаний, представлений и гипотез о соответствующем объекте или явлении. Поскольку эти знания никогда не бывают абсолютными, а гипотезы могут вынужденно или намеренно не учитывать некоторые эффекты, модель лишь приближенно описывает поведение реальной системы. Важнейшая особенность модели состоит в возможности неограниченного накопления специализированных знаний без потери целостного взгляда на объект исследования. Любые научно-технические расчеты (на прочность, устойчивость, надежность, безопасность, точность и т. п.) — важнейшие элементы профессиональной деятельности инженера — в сущности, являются специализированными видами моделирования. В [39] приводится ряд постепенно усложняемых моделей радиоэлектронных устройств — от диода до лазерного излучателя.

При исследовании сложных систем может потребоваться разработка *набора* моделей, соответствующих различным иерархическим уровням рассмотрения и функциональным аспектам деятельности системы. Такое описание на каждом уровне использует свой набор понятий и терминов.

Моделирование может быть натурным (физическим), математическим и комбинированным.

В сравнении с натурным экспериментом математическое моделирование имеет следующие преимущества:

1. Экономичность и сбережение ресурсов реальной системы.
2. Возможность разделить любое исследование на *предметные* вопросы, относящиеся к изучаемым объектам, и *логические*, разрешаемые средствами языка.
3. Возможность моделирования гипотетических, т. е. не реализованных в натуре объектов (прежде всего на разных этапах проектирования).
4. Возможность реализации режимов, опасных или трудновоспроизводимых в натуре (глобальные последствия 100-мегатонного ядерного конфликта, критический режим ядерного реактора, работа системы ПРО).
5. Возможность изменения масштаба времени.
6. Легкость многоаспектного анализа.
7. Сжатие информации и ее единообразное представление, способствующие усмотрению целого.
8. Наличие строго сформулированных правил, позволяющее:
   - вскрыть ложность некоторых предубеждений;
   - заменить содержательные рассуждения формальным преобразованием выражений — в частности, выполнить оптимизацию;
   - выявить глубинные (сущностные) свойства и отношения и как следствие получить бóльшую прогностическую силу и построить разнообразные аналогии.

9. Универсальность технического и программного обеспечения проводимой работы (ЭЦВМ, системы программирования и пакеты прикладных программ широкого назначения).

Результаты расчетов часто позволяют предсказывать и обнаруживать не наблюдавшиеся ранее явления.

Математическое моделирование на определенных этапах исследования может сочетаться с натурным. Классическим примером такого подхода является исследование динамики летательного аппарата на комплексе из математической модели движения самого аппарата, воспроизводимой на аналоговой или цифровой ЭВМ, и макета реальной аппаратуры управления. Практическое использование модели возможно лишь после тщательного ее исследования и настройки.

Моделирование требует установления *критериев подобия*, т. е. формулировки тех условий, при которых модель может считаться закономерно отражающей (в том или ином смысле) оригинал. Полным считается подобие во времени и пространстве (с отвлечением от несущественных процессов), неполным — только во времени или в пространстве. При этом возможно введение масштабов. В [3, 14] приведены сводки критериев механического, гидродинамического, теплового, электрического подобия.

Весьма поучительный пример моделирования с использованием критериев подобия приводится в воспоминаниях А. Н. Крылова о его службе в опытовом бассейне [50, с. 133]: «Я приказал вычисление сопротивления (воды — движению судна — *Ю. Р.*) делать следующим образом. Из наблюденного при работе с моделью сопротивления вычесть рассчитанное сопротивление от трения: получится остаточное сопротивление, которое умножается на куб масштаба и дает остаточное сопротивление корабля. К этому остаточному сопротивлению прибавляется рассчитанное сопротивление от трения на корабль — получится полное сопротивление корабля при скорости его, соответствующей скорости модели».

Структура моделирования показана на рис. 1.1.

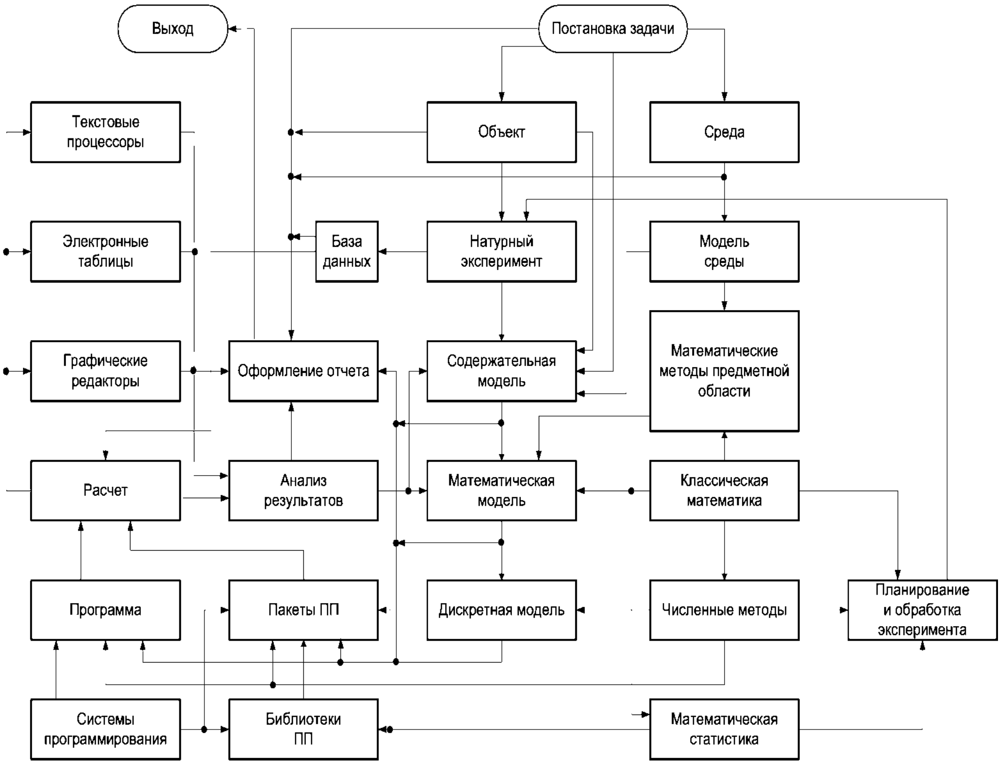

Рис. 1.1. Организация математического эксперимента

В контексте данной книги мы будем обсуждать преимущественно математические аспекты моделирования.

1.2. Виды математических моделей

Математическое моделирование можно разделить на аналитическое, имитационное и комбинированное. При *аналитическом* моделировании процессы функционирования элементов системы записывают в виде алгебраических, интегральных, дифференциальных, конечно-разностных и других соотношений и логических условий.

В круге аналитических методов прежде всего нужно выделить дающие общее представление о явлении. *Качественная* теория дифференциальных уравнений позволяет выявить структуру всех возможных решений — регулярных и особых. В ее основе лежит понятие *фазового* *портрета* системы: траектории состояния в осях «переменная — производная от нее». На фазовой плоскости наглядно видны устойчивый и неустойчивый процессы (сходящаяся и расходящаяся спирали соответственно), устойчивые колебания (эллипс), аттракторы (предельные режимы) и области их притяжения и т. п. Качественные методы позволяют установить свойства спектра, монотонность зависимостей, выпуклость и т. д. Это существенно влияет на выбор метода решения.

Под *аналитическим решением* в узком смысле слова понимают явную формулу, связывающую искомую величину с параметрами модели. Ее исследование дает весьма ценную информацию. Возьмем для примера формулу Полячека—Хинчина для среднего времени ожидания заявки в системе массового обслуживания вида $M/G/1$:

$$w = \frac{\lambda b_2}{2(1 - \lambda b_1)}, \tag{1.2.1}$$

где λ — интенсивность потока заявок, а $\{b_k\}$ — начальные моменты распределения длительности обслуживания. Ясно, что произведение λb_1 (коэффициент загрузки системы) должно быть строго меньше единицы, и при его устремлении к единице среднее время ожидания стремится к бесконечности. Далее, второй момент распределения обслуживания $b_2 = b_1^2 + D$, где D — дисперсия. При фиксированных λ и b_1 ожидание w минимально при регулярном обслуживании $(D = 0)$, а при переходе к обычно используемому показательному закону увеличивается ровно вдвое.

Такое решение («замкнутое») всегда предпочтительно, но вывести его обычно удается лишь после ряда упрощающих предположений. Возможность его получения весьма критична к изменениям модели; здесь требуются высокая квалификация и значительные творческие усилия разработчиков.

Решение задачи часто удается получить с помощью преобразований (Лапласа, Фурье и др.) исходных функций к виду, где легче выполняются нужные операции (дифференцирование, интегрирование, свертка). Затем выполняется обратный переход.

При исследовании процессов вариационными методами проводится оптимизация *функционала* — функции от функции, при оптимальном выборе которой можно достичь минимальных промаха, энергозатрат или времени достижения желаемого состояния.

Гораздо чаще удается применить *численные* методы — в особенности при наличии хорошей библиотеки подпрограмм. Численные методы дают лишь частные результаты, по которым трудно делать обобщающие выводы. Для оптимизации модели необходим многовариантный счет. Если решением задачи является функция непрерывной переменной, то эта функция часто заменяется сеточной функцией, определяемой лишь для некоторых дискретных аргументов. Получаемые алгоритмы называют разностными схемами. Анализ разностных схем позволяет выделить их специальные классы — однородные, устойчивые, помехоустойчивые, экономичные и др.

Выбор модели тем эффективнее, чем больше данных имеется о конечном решении задачи. В процессе прикидочных исследований осуществляется сравнение величин отдельных членов уравнений в изучаемом диапазоне изменения переменных и параметров задачи. Относительно малые слагаемые отбрасываются, нелинейные зависимости линеаризуются, случайные величины заменяются их математическими ожиданиями. Иногда оказывается достаточным даже грубое приближение (например, при решении задач оптимизации с пологими экстремумами). Однако в окрестности экстремума аппроксимация должна быть минимум квадратичной.

Как при аналитических выкладках, так и при численном решении должны проверяться:

- совпадение размерностей складываемых (вычитаемых) величин;
- соблюдение специфических для предметной области соотношений типа законов сохранения;
- осмысленность решения при устремлении параметров к предельным значениям (например, нулю, единице или бесконечности);
- факт задания и выполнение начальных и граничных условий;
- физический смысл промежуточных результатов;
- однозначность решения;
- устойчивость решения при малых вариациях параметров.

При *имитационном* моделировании реализующий модель алгоритм воспроизводит процесс функционирования системы во времени и в пространстве, причем имитируются составляющие процесс элементарные явления с сохранением его логической и временной структуры. Имитационное моделирование усугубляет недостатки численного, но зато практически свободно от ограничений на класс решаемых задач. Обычная сфера его применения — дискретные случайные процессы (стационарные).

Весьма перспективно *комбинированное* моделирование, сочетающее (в умелых руках) достоинства всех рассмотренных подходов.

1.3. Требования к математическим моделям

Возможность исследования того или иного явления реального мира некоторым математическим методом определяется формальными свойствами построенной модели. Познание разделяется на два этапа: формирование математической модели и получение логических следствий из нее. Оба этапа требуют *осознания и четкой фиксации сделанных допущений и принятых ограничений*. Составление модели требует проникновения в природу вещей и достижения *внешнего* правдоподобия — достаточной степени адекватности математической модели реальному объекту по интересующим исследователя свойствам.

Под *внутренним* правдоподобием понимается ожидаемая точность реализации математических соотношений. Между ними должен быть разумный баланс: точность вычислений должна соответствовать точности исходных данных. Возможны и отклонения от этого принципа: к максимальному уровню внутреннего правдоподобия независимо от уровня внешнего стремятся, если:

- осуществляется проверка внешнего правдоподобия;
- речь идет о разработке нового метода исследований, который предполагается применить к широкому, не фиксированному заранее классу моделей.

Разумеется, искусственное понижение точности счета (например, счет в укороченной по отношению к формату машинного слова разрядной сетке, загрубление алгоритмов расчета стандартных математических функций) бессмысленно.

Второй этап требует умения найти и использовать нужный аппарат. На последний часто наталкивает рассмотрение частных случаев и результатов численных расчетов. Это прежде всего отбор влияющих факторов, а также предельное поведение параметров (например, в задачах теории надежности — быстрое восстановление, простейший поток отказов).

1.3.1. Адекватность

Математический эксперимент всегда проводится над абстрактной *моделью* явления, которая, однако, может оказаться недостаточно адекватной оригиналу.

Всякая модель не учитывает некоторые свойства оригинала и потому является его *абстракцией*. Приведем наиболее популярные примеры абстракций:

- Модель абсолютно твердого тела — уравнения движения тел в астрономии, баллистике, динамике полета (для ракеты с жидким топливом такая модель не подходит).
- Сплошная упругая среда в теории упругости.
- Ферма с идеальными шарнирами в строительной механике.
- Вязкая жидкость в гидромеханике.
- Идеальный газ — уравнения Эйлера для невязкого газа.
- Кинетическая теория газов — уравнения Больцмана.
- Экосистемы «хищник — жертва» — уравнения Вольтерра.
- Динамика боя — уравнения Ланчестера, Динера и др.

Чем более высок уровень обобщения, тем грубее модель и шире область интерпретации результатов моделирования.

Первым шагом в решении любой задачи обычно является построение линейной модели, которая позволяет пользоваться принципом *суперпозиции*: реакции на компоненты суммарного сигнала суммируются. Члены низкого порядка разложения функции в ряд Фурье несут обобщенную информацию о ней, высокого — более частную. При распознавании плоских фигур сопоставляют их моменты относительно координатных осей, начиная с моментов нулевого порядка (площади). Первые моменты определяют положение центра масс, вторые — моменты инерции и т. д. Сходство двух образов оценивается по совпадению нескольких начальных моментов. Аналогичный подход применяется и при сравнении распределений случайных величин.

Порой удается построить достаточно простую модель, которая передает основные тенденции явления в некотором диапазоне условий. Например, аэродинамика первоначально строилась в предположении, что воздух является идеальной несжимаемой жидкостью. Такая модель среды действовала безотказно, пока скорости самолетов не превышали 200 км/час. Далее потребовалось учитывать сжимаемость воздуха. Принципиальные изменения пришлось внести при приближении к сверхзвуковым скоростям. Наконец, модель гиперзвуковой аэродинамики учитывает сложные физико-химические процессы в ближайшей окрестности летательного аппарата и на его поверхности.

Другой пример простой и эффективной модели — ньютоновская теория тяготения, созданная для описания солнечной системы (небесные тела рассматривались как материальные точки). Она позволила определить массы планет и их расстояния от Солнца и, более того, *предсказать* существование двух планет (Нептуна и Плутона) и открыть их. Однако ее пришлось уточнять для движения Меркурия (релятивистские эффекты) и низкоорбитальных спутников и ракет (нецентральность поля тяготения Земли и его локальные искажения, моделируемые системой дополнительных точечных масс).

При разработке новой системы для начала строится и оптимизируется стандартными методами простейшая модель, учитывающая лишь важнейшие факторы. При этом вычисление каждого значения функции оказывается менее трудоемким, упрощается структура линий уровней (постоянства значений) целевой функции. Затем модель постепенно усложняется за счет учета все новых и новых факторов и ставятся задачи оптимизации по все большему числу параметров. Решение каждой из них обычно оказывается хорошим начальным приближением для следующей. Усложнение заканчивается, когда ввод новых дополнительных факторов перестает заметно влиять на целевую функцию.

При последовательном решении подзадач можно уже после получения первых результатов обнаружить рассогласование математической модели с исходным процессом и внести необходимые коррективы. Есть точка зрения [10, с. 347], что крайне трудные для обсчета целевые функции с узкими и длинными ямами («оврагами») возникают при неудачном выборе математической модели явления.

Точная модель, как правило, имеет более узкую область применения, зато представляет в ней бо́льшую практическую ценность. В частности, она может использоваться непосредственно в контуре управления производственным процессом. Сравниваемые модели должны быть сопоставимы — работать при одних и тех же внешних условиях.

Многомерные математические задачи обычно возникают из описания сложных процессов. Эти описания являются довольно грубыми, и при решении многомерных задач следует требовать меньшей точности.