УДК 57.087
DOI: https://doi.org/10.17816/edgcc90124

INVERSE PROBLEMS OF SOIL BIOKINETICS

M.V. Glagolev
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

Corresponding author: M.V. Glagolev, m_glagolev@mail.ru

Цитирование: Glagolev M.V. 2021. Inverse problems of soil biokinetics // Environmental Dynamics and Global Climate Change. V. 12. N. 2. P. 145-166. DOI: https://doi.org/10.17816/edgcc90124

This work represents the materials of the report prepared at the suggestion of N.S. Panikov in 1985–1986, when the author was a third-year student at the Faculty of Soil Science, M.V. Lomonosov Moscow State University.

The report contains definitions of direct and inverse problems. A classification of inverse problems and several examples of such problems encountered in soil science and biological kinetics are given. The question of the ill-posed inverse problems is touched, and the main methods of their solution are briefly listed. The problem of identifying a gas source in a soil column by the layer-by-layer mass balance method (based on measurements of the dynamics of the concentration field) is considered in detail. This task is shown as a computer program, and for others, useful links to programs published in the literature are given.

Keywords: inverse problems, soil biokinetics, ill-posed problems.

Данная работа представляет собой материалы доклада[1], подготовленные по предложению Н. С. Паникова в 1985–1986 гг. в бытность автора студентом 3-го курса факультета почвоведения2 МГУ им. М.В. Ломоносова.

В докладе приводятся определения прямой и обратной задачи. Дана классификация обратных задач и несколько примеров таких задач, встречавшихся в почвоведении и биологической кинетике. Затронут вопрос о некорректности обратных задач и кратко перечислены основные методы их решения. Подробно рассмотрена задача идентификации источника газа в почвенной колонке послойно-балансовым методом (по измерениям динамики концентрационного поля). Эта задача доведена до компьютерной программы, а для других даны полезные ссылки на программы, опубликованные в литературе.

Ключевые слова: обратные задачи, почвенная биокинетика, некорректные задачи.

[1] Данный доклада был подготовлен для выступления на 2-й Выездной зимней школе факультета почвоведения МГУ (Пущино, 1986 г.), но по имеющейся у нас информации автор там не выступал. Публикуемый ныне текст восстановлен нами по сохранившимся наброскам и черновикам (здесь же заметим, что в связи с этим одному из издателей пришлось, во-первых, собственоручно переделать рис. 2, используя современные технические средства, ибо в «рукописи» он был выполнен наскоро от руки и, во-вторых — в тесном контакте с автором — во многих литературных ссылках было добавлено указание на конкретные страницы, поскольку автором номера страниц в большинстве случаев указаны не были). Кроме того, нами были сокращены чрезвычайно подробные описания ряда методов, которые все равно лучше описаны в специальной математической литературе, а ссылки на литературу были оформлены по правилам данного журнала. При этом объем статьи стал почти таким, который соответствует правилам журнала для раздела «Обзоры и лекции» (мы посчитали, что доклад на студенческой Школе ближе всего к лекции, и поэтому он должен быть опубликован именно в этом разделе). Поскольку не удалось найти оригинальную распечатку первоначальной компьютерной программы, мы привели версию, созданную двумя годами позднее. Отличие этой версии от исходной состоит в более совершенной процедуре минимизации POISK-4, взятой из [Крутько и др., 1988, с. 272–275] (насколько известно, в первоначальной версии вместо нее использовался метод Хука-Дживса, работавший не слишком хорошо, из-за чего автор от него быстро отказался и в конце 80-х — начале 90-х годов для решения оптимизационных задач использовал POISK-4, а в дальнейшем — метод Нелдера-Мида). — *Примечание издателей (к.б.н. Д.В. Ильясова и М.В. Янина).*

[2] Параллельно М.В. Глаголев обучался по индивидуальному учебному плану на факультете вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова. — *Примечание издателей.*

DOI: https://doi.org/10.17816/edgcc90124

При виде лис во мраке
привиделись вам раки.

Бонифаций и Герман Лукомников[1]

ВВЕДЕНИЕ

Понятие обратной задачи

Опираясь на диалектический материализм, почвоведение, как самостоятельная наука, разработало свои собственные, характерные только для этой отрасли знания методы и приемы исследования. Однако также почвоведение широко пользуется новейшими методами, заимствованными из основных смежных дисциплин — физики, химии, биологии и др. В частности, в последние годы в почвоведении разрабатываются методы электронно-математического моделирования процессов. Поскольку почвы рассматриваются советским почвоведением как образования, находящиеся в непрерывном развитии [Ковда, 1973], то в первую очередь речь идет о математических моделях физической, химической и биологической кинетики.

Имеется большое число работ, посвященных построению систем кинетических уравнений[2] конкретных микробиологических и почвенных процессов [Фишман и др., 1969; Мироненко и Пачепский, 1980; Бондаренко и др., 1981; Гончар-Зайкин и др., 1981; Паников, 1984; Бирюков и Кантере, 1985]. Но для одной и той же математической модели может быть поставлено две принципиально различных задачи: прямая и обратная.

Как известно, деление задач на прямые и обратные опирается на то, как они ориентированы по отношению к направлению причинно-следственной связи: по ходу последней или против хода [Преображенский и Пикалов, 1982]. Иначе говоря, ***если по причине нам нужно рассчитать следствие, то это — прямая задача***. Но ***если по следствию нам нужно «рассчитать причину», то это — обратная задача.***

Например, прямой задачей будет являться расчет динамики потребления крахмала почвенными микроорганизмами, исходя из известных кинетических параметров микробов. Действительно, ***причиной*** наблюдаемой динамики потребления крахмала являются свойства микроорганизмов, количественным выражением которых являются соответствующие кинетические константы. А динамика потребления крахмала — ***следствие*** того, что микроорганизмы имеют именно такие кинетические параметры. В частности, если бы максимальная удельная скорость роста была больше или экономический коэффициент был бы меньше, то потребление питательного субстрата происходило бы быстрее. Наблюдаемая в эксперименте динамика потребления крахмала является следствием того, что кинетические константы именно таковы. И раз мы по причине (т.е. по значениям кинетических констант) рассчитываем следствие (динамику концентрации крахмала), значит, мы решаем ***прямую задачу***.

Но можно поставить задачу и наоборот: пусть необходимо по известной динамике потребления крахмала найти такие значения кинетических констант, которые бы ей соответствовали (соответствовать будут далеко не любые значения, например, слишком большая удельная скорость роста привела бы к тому, что крахмал потребился бы быстрее, чем это наблюдалось в реальном эксперименте). В этом случае задача поставлена так, что по следствию (динамике концентрации крахмала) мы пытаемся рассчитать причину (значения кинетических параметров микробов), т.е. решаем ***обратную задачу***.

Будем использовать компактную и обладающую общностью запись в виде операторного уравнения 1-го рода

$$A(y) = f, \quad y \in Y, \quad f \in F, \tag{1}$$

где y и f — искомая и известная функции; Y и F — некоторые гильбертовы пространства; A — непрерывное отображение Y в F [Верлань и Сизиков, 1978, с. 136–137]. В этой записи y соответствует характеристике причины, а f — характеристике следствия (поэтому для краткости y будем называть «причиной», а f — «следствием»; отображение A позволяет для любой «причины» y рассчитать «следствие» f. В общем случае y и f могут быть функциями совершенно разных аргументов, поэтому формально запишем: $y = y(s)$, $f = f(x)$, где $a \le s \le b$, $c \le x \le d$.

[1] Поскольку из набросков доклада было видно, что ему предполагалось предпослать некий эпиграф, но самого эпиграфа мы не обнаружили (и даже автор не мог его вспомнить), мы выбрали из списка любимых эпиграфов Михаила Владимировича тот, который, на наш взгляд, отражает (хотя и никчемными — поэтическими —— средствами) специфику некорректных обратных задач интерпретации и идентификации. Впрочем, именно этот эпиграф никак не мог быть в реальности предпослан докладу, ибо появился, по всей вероятности, позднее 1986 г. (выдающийся российский поэт Бонифаций-Лукомников начал выступать лишь с конца 1980-х гг.). — *Примечание издателей*.

[2] Такие уравнения связывают скорость процесса с параметрами, от которых она зависит, т.е. с концентрацией, температурой и др. [Безденежных, 1973, с. 8].

DOI: https://doi.org/10.17816/edgcc90124

Типы обратных задач

В современной литературе термин «обратные задачи» используется для различных типов задач. В Марчук [1980, с. 333] рассматривается два типа:

1) «Обратные эволюционные задачи» — задачи определения состояния некоторого процесса в предыдущие моменты времени.

2) Задачи, в которых требуется восстановить оператор с известной структурой, но с неизвестными коэффициентами, подлежащими определению на основе информации о функционалах от решений (сюда относятся очень широко распространенные задачи определения численных значений коэффициентов математических моделей в том случае, когда вид уравнений модели задан).

К этим типам задач можно добавить, как минимум, еще три:

3) Несколько усложняя задачу 2-го типа, можно потребовать восстановить оператор с известной структурой, но с неизвестными функциями. Среди широко распространенных задач этого типа упомяну решение интегральных уравнений 1-го рода (ИнУПеР).

4) Обобщая задачу 2-го типа, придем к еще более сложной постановке: на основе информации о функционалах от решений требуется восстановить оператор с неизвестной структурой (т.е., фактически, речь идет о построении уравнений математической модели для адекватного описания экспериментальных данных).

5) Задача управления.

Логично предположить, что разные типы обратных задач потребуют для своего решения различных методов. Действительно, в задачах 1-го и 3-го типов нам необходимо найти ***функцию***, в задачах 2-го типа — ***набор чисел*** (параметров уравнений), а в задачах 4-го типа — ***систему уравнений***. К сожалению, в кратком докладе невозможно подробно осветить все столь разнородные задачи, поэтому ниже я лишь приведу отдельные примеры задач, перечислю (только перечислю!) некоторые методы их решения, а основное внимание уделю одной частной задаче, поставленной С. В. Каспаровым и выдающимся советским почвоведом О. И. Минько.

Используемые сокращения

б/н — без названия;
ИнУПеР — интегральные уравнения 1-го рода;
ПоБаС — послойно-балансовый способ;
СКО — сумма квадратов отклонений;
СЛАУ — система линейных алгебраических уравнений;
НеЗ — некорректная задача;
НеП — неустранимая погрешность;
ОЗ — обратная задача;
ЦВМ — цифровая вычислительная машина.

ПРИМЕРЫ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В ПОЧВОВЕДЕНИИ И БИОКИНЕТИКЕ

Тип 1: эволюционные обратные задачи

Типичным примером эволюционной ОЗ может служить задача об определении начального распределения температуры в почве, если известно температурное поле к данному моменту времени (а также известны теплофизические характеристики почвы и граничные условия). Здесь под «начальным» моментом времени я подразумеваю некоторый заданный момент времени, ***предшествующий*** тому, когда проводятся измерения.

Совершенно аналогично обратная задача такого типа может быть поставлена и для других полей, например, для поля концентраций какого-либо газа: определить начальное распределение газа в почве, если известно поле концентраций этого газа к данному моменту времени (а также известны граничные условия и, так сказать, «газофизические» характеристики почвы — воздухопроницаемость, коэффициент диффузии и др.).

Тип 2. Косвенная идентификация параметров по экспериментальным данным

Пожалуй, на сегодня эта задача встречается в практике кинетических исследований чаще всего. Именно по этой причине я коснусь ее очень кратко, ибо задача эта изучена «вдоль и поперек» в чрезвычайно обширной литературе — см., например, [Безденежных, 1973, с. 115–249; Полак и др., 1984, с. 159–172; Rosenbrock and Storey, 1966, chapter 8].

Коэффициенты системы уравнений находятся из экспериментальных данных. Задача нахождения коэффициентов, наилучшим образом приближающих модель к экспериментальным данным реального процесса довольно сложна. Наиболее целесообразно свести ее к задаче минимизации суммы квадратов отклонений измеряемых значений и рассчитанных по модели, а для нахождения минимума применить градиентные методы нелинейного программирования с использованием ЦВМ [Фишман и др., 1969, с. 225]. Техника наименьших квадратов (и ее обобщение — метод среднеквадратичного приближения) разработана достаточно хорошо [Березин и Жидков, 1966, с. 310–360; Кафаров и др., 1972, с. 319–346; Безденежных, 1973, с. 150–

158, 164–171; Калиткин, 1978, с. 51–65; Shoup, 1979, chapter 8 (8.3); Huber, 1981, chapter 7]. Однако поскольку чебышевская норма сильнее нормы L_p, то принято считать, что равномерная аппроксимация лучше аппроксимации в среднем, поэтому поиску равномерных (и особенно *наилучших равномерных*) приближений посвящено много работ [Микеладзе, 1953, гл. 5; Collatz, 1964, §26; Березин и Жидков, 1966, с. 270–309; Ляшко и др., 1977, с. 73–78; Калиткин, 1978, с. 66–69; Глушков и др., 1983, с. 189–192]. Впрочем, кроме суммы квадратов разностей между экспериментальными и модельными данными (в методе наименьших квадратов) и чебышевской нормы (в методе равномерного приближения), при решении обратной кинетической задачи используются и другие функционалы, примеры которых см. в [Микеладзе, 1953, с. 148–149, 242–243; Rosenbrock and Storey, 1 966, chapter 8: eq. (11); Кафаров и др., 1972, с. 297–299, 315; Безденежных, 1973, с. 234–239; Данилина и др., 1976, с. 247; Cornish-Bowden, 1976, chapter 10 (10.3); Кафаров и др., 1979, с. 72–73; Блохина и Угодчиков, 1980, с. 144; Димитров, 1982, с. 196–202; Глушков и др., 1983, с. 197; Полак и др., 1984, с. 161–162].

К сожалению, т.к. в реальном случае эксперимент проводится в течение ограниченного времени, то, с одной стороны, это время может оказаться недостаточно большим, чтобы определить константы скорости медленных процессов, а с другой — временн***о***е разрешение экспериментальных измерений может оказаться недостаточным для определения констант скорости быстрых процессов; может также возникнуть ситуация, когда имеют место оба этих случая одновременно [Полак и др., 1984, с. 160]. Вряд ли тут что-то можно сделать чисто математическими средствами — необходима постановка хорошо продуманных экспериментов, позволяющих надежно вычислить каждый параметр модели (для уменьшения числа потребных опытов целесообразно использовать при исследовании процесса специальные методы планирования эксперимента [Фишман и др., 1969, с. 225; Безденежных, 1973, с. 215–234]).

Тип 3. Интегральные уравнения 1-го рода

К таким уравнениям относится довольно много естественно-научных моделей, на которых я останавливаться не буду, поскольку, во-первых, им посвящена богатая литература — см., например, [Верлань и Сизиков, 1978, с. 138–142; Воскобойников и др., 1984, с. 15–30], а, во-вторых, в почвенной биокинетике мне такие модели не известны и, смею предположить, если они там существуют, то не имеют широкого распространения.

Тип 4: общая обратная задача кинетики

Кинетическая ОЗ, о которой речь шла выше в разд. «Тип 2. Косвенная идентификация параметров по экспериментальным данным», состоящая в том, чтобы по экспериментальным данным найти численные значения параметров заданной математической модели, может быть названа «частной обратной кинетической задачей» или «обратной кинетической задачей идентификации ***параметров***».

Решение общей кинетичексой ОЗ состоит в построении модели, описывающей имеющийся экспериментальный материал. Математически выбор такой модели означает построение и запись правой части системы дифференциальных уравнений. Следовательно, необходимо сформулировать предположения о наборе компонент, участвующих в процессе и о типе кинетического закона [Полак и др., 1984, с. 159]. Но мне кажется, что обычно в естественных науках на задачи 4-го типа не обращают особого внимания, записывая математические модели, исходя из фундаментальных физических законов, как правило — законов сохранения. Эти законы, безусловно, применимы и для построения моделей почвенной биокинетики.

Для микробиологических процессов около 300 кинетических законов собрано в только что вышедшей прекрасной книге [Бирюков и Кантере, 1985, табл. 22–29]. Однако существует известный произвол в подробности описания, и где тут следует остановиться — каждый исследователь решает для себя сам. К сожалению, обычно это решение принимается весьма произвольно. Печальный опыт показывает, что часто модели оказываются существенно «сложнее» той экспериментальной информации, которая используется для их проверки. Можно пояснить это на следующем несколько утрированном примере: микробиолог, знающий, что изучаемые им бактерии покрыты жгутиками, пытается в модель потребления субстрата «засунуть» и этот факт, подробно выписывая члены активного движения биомассы бактерий в соответствующем уравнении неразрывности. Формально — все правильно. Но имеющиеся у него куцые экспериментальные данные по убыли питательного субстрата никоим образом не позволяют отличить эту ситуацию от гораздо более простой — той, в которой микроорганизмы к собственному активному движению в среде не способны.

Одной из главных проблем при решении обратной кинетической задачи является определение набора параметров, значения которых могут быть найдены для данной кинетической схемы на основе имеющейся экспериментальной информации. Если при решении кинетической ОЗ закладывается сложный механизм, состоящий из большого числа стадий, то, как правило, могут быть определены некоторые ***комбинации*** неизвестных констант, а не сами эти константы [Полак и др., 1984, с. 160]. По сути дела, такая ситуация говорит о необходимости упрощения уравнений модели. И, собственно говоря, тогда именно в этом и будет состоять решение общей обратной кинетической задачи: найти такую структуру математической модели (такие уравнения), чтобы они адекватно описывали экспериментальные данные, но не были бы «сложнее» этих данных, т.е. чтобы все члены уравнений модели надежно идентифицировались при помощи имеющихся экспериментальных данных. Некоторые общие подходы к решению задач с точки зрения поиска максимально простой адекватной модели, в достаточной мере обеспеченной имеющейся экспериментальной информацией (при заданной точности этой информации), можно найти в [Марчук, 1980, с. 356–375].

Тип 5: задача управления

Такие задачи характерны для промышленной микробиологии — см., например, [Бирюков и Кантере, 1985, с. 197–270], однако и в почвенной биокинетике они могут встретиться, например, при разработке оптимальных биотехнологических процессов очистки почв от нежелательных компонентов, в частности, загрязнений. Впрочем, если отвлечься от основной темы доклада и посмотреть несколько шире, то следует отметить, что вообще в почвоведении и земледелии сфера приложения задач управления гораздо шире и не сводится к одной только биокинетике.

Так, например, Куртенер и Чудновский [1979, с. 85–96] рассмотрели задачи тепловой мелиорации, связанные с расчетом такого управления нагревательными устройствами, при котором разогрев почвы происходил бы как можно быстрее или за заданное время. Кроме того, успешно решаются общие задачи управления оросительными системами — оперативное водораспределение в комплексе с автоматизацией полива сельскохозяйственных культур. На осушительно-увлажнительных системах разработки автоматического регулирования значительно отстают (по сравнению с оросительными системами). Тем не менее в настоящее время разработана схема регулирования также и для осушительно-увлажнительных систем [Коваленко, 1983, с. 16–19]. Сиднева и Яковлева [1985] изучили управление известкованием почв. Есть перспективы и у решения задачи управления солепереносом: моделирование сезонной динамики солей с учетом структуры миграции позволит выявить возможности управления солевым режимом почв, в особенности богарных [Козловский, 1977].

Значительное число работ было посвящено задачам управления плодородием и запасами гумуса (как материального индикатора абстрактного «плодородия»). Так, Лисецкий и Швебс [1985] построили модель ресурсов плодородия почвы, которая позволила разработать процесс непрерывного управления состоянием почвенного ресурса, чтобы обеспечить поддержание плодородия на запланированном уровне. Журавлев и др. [1985] разработали классификатор типовых вариантов управления режимами воспроизводства гумуса в неоднородном почвенном покрове. Близкая задача выработки структуры управляющих воздействий, направленных на оптимизацию основных почвенных режимов и формирование окультуренных разновидностей почв с заданными свойствами и составом упомянута в [Носко и др., 1985].

ПРОБЛЕМА НЕКОРРЕКТНОСТИ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

Корректные, некорректные и условно корректные задачи

Понятие корректности было введено Адамаром: задача определения решения y по заданным входным данным f, связанным между собой некоторой функциональной зависимостью $y = R(f)$, называется *корректной (корректно поставленной)*, если:

- Всякому элементу $f \in F$ соответствует решение $y = R(f) \in Y$;
- Решение определено однозначно;
- Задача $y = R(f)$ устойчива, т.е. для любой точности ε можно указать такое $\delta(\varepsilon)$, что для $y_1 = R(f_1)$ и $y_2 = R(f_2)$ если $\rho_F(f_1, f_2) \le \delta(\varepsilon)$, то $\rho_Y(y_1, y_2) \le \varepsilon$ (где ρ_F и ρ_Y — расстояния соответственно в F и Y), или обратный оператор $A^{-1} \equiv R$ непрерывен на F. Другими словами, ***малым возмущениям входных данных соответствуют малые возмущения решения***.

Если хотя бы одно из этих условий не выполняется, то задача называется *некорректной (некорректно поставленной)* [Верлань и Сизиков, 1978, с. 136–137].

Обратные задачи часто оказываются в классическом смысле поставленными некорректно. Малым изменениям в регистрируемых функционалах могут соответствовать большие изменения в решениях задач [Марчук, 1980, с. 333]. Для задач идентификации параметров моделей биокинетики это означает, что небольшие изменения измеряемых величин (биомасс микроорганизмов, концентраций субстратов, активностей ферментов и др.) приводят к существенным изменениям параметров (таких как удельные скорость отмирания и максимальная скорость роста, константы полунасыщения, экономические коэффициенты и т.п.). Иначе говоря, ***разные наборы биокинетических параметров описывают примерно одинаковые биокинетические кривые*** («примерно одинаковые» здесь имеет тот смысл, что они, возможно, в действительности разные, но при той погрешности с который проводятся наши измерения, надежно различить их мы не в состоянии). Это можно легко понять на следующем несколько утрированном примере.

Предположим, в почве присутствуют некоторые организмы, способные потреблять некий субстрат. Пусть имеется математическая модель этого процесса, в которую входят два параметра: количество этих организмов и их активность (которая может меняться от 0 — для мертвых микробов — до какого-то предельного значения для максимально жизнеспособных микроорганизмов). Динамика потребления субстрата будет практически одинаковой при большом количестве неактивных организмов и малом количестве активных. Таким образом, однозначно идентифицировать численные значения этих двух параметров, имея только измерения концентарции субстрата, мы не сможем.

Долгое время некорректные задачи (НеЗ) считались неинтересными и исследовались мало. Их интенсивное изучение началось в связи с необходимостью интерпретации геофизических данных. Большой вклад в развитие теории и методов решения задач, не являющихся корректными в классическом смысле (по Адамару), внесли советские математики. Было показано, что решение НеЗ становится устойчивым по отношению к изменениям данных, если наложить на множество допустимых решений некоторые дополнительные ограничения. Задачи такого типа получили название *условно корректных* [Марчук, 1980, с. 333].

Кратко о методах решения некорректных задач

В связи с необходимостью построения приближенных решений условно корректных задач по приближенным данным было введено понятие регуляризующего семейства по Тихонову, суть которого состоит в следующем. Условно корректной задаче сопоставляется семейство классических корректных задач (регуляризующее семейство), зависящее от параметра («параметра регуляризации»)[1], причем при стремлении этого параметра к некоторому пределу последовательность решений классически корректных задач должна стремиться к решению интересующей нас условно корректной задачи [Марчук, 1980, с. 333–334]. Используются многочисленные ***методы регуляризации***: Тихонова (0-го порядка, или слабой регуляризации; 1-го порядка, или равномерной регуляризации; частичной регуляризации 1-го порядка; 2-го и более высоких порядков), Лаврентьева, модификация метода Тихонова на основе метода Лаврентьева [Верлань и Сизиков, 1978, с. 143] и ряд других способов, в частности, модификации метода собственных функций. Среди последних с методом регуляризации Тихонова коррелирует ***метод квазирешений Иванова***, а с методом регуляризации Лаврентьева — ***метод Бакушинского*** [Верлань и Сизиков, 1978, с. 217–219].

Замечу, что получившему наибольшие известность и распространение методу регуляризации А. Н. Тихонова предшествовал[2] ряд методов (в частности, ***методы Филлипса и Филлипса-Туоми***), которые по структуре алгоритма внешне были весьма близки к способу Тихонова [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 54–71]. Если ограничиться только рассмотрением минимизируемого функционала, то, на мой взгляд, методы Филлипса и Филлипса-Туоми это частные случаи регуляризации Тихонова (соответственно, 2-го и 3-го порядков). Однако выбор параметра регуляризации в этих методах осуществляется иначе, нежели у Тихонова. Вообще же, глядя с весьма общих позиций можно сказать, что в методе регуляризации и близкородственных ему методах вместо уравне-

---

[1] Наиболее сложным этапом в алгоритмах регуляризации Тихонова и Лаврентьева (как и в методах Филлипса, Иванова и статистических методах), является определение параметра регуляризации [Верлань и Сизиков, 1978, с. 171]. Однако к настоящему времени и этот этап уже довольно хорошо разобран в специальной литературе — см., например, [Верлань и Сизиков, 1978, с. 171–191; Калиткин, 1978, с. 468; Преображенский и Пикалов, 1982, с. 73–76, 90; Воскобойников и др., 1984, с. 155–168; Гончарский и др., 1985, с. 21–23].

[2] Следует подчеркнуть, что относящиеся сюда публикации появлялись необязательно до 1963 г., когда вышли из печати основополагающие работы А.Н. Тихонова. Развитие более ранних направлений исследования некорректных задач продолжалось и в дальнейшем, причем под влиянием принципов тихоновской регуляризации первоначальные схемы методов заметно модифицировались, так что в настоящее время вряд ли возможно провести какую-то четкую грань, отделяющую одну группу методов от другой [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 54].

ния (1) решается некоторое другое уравнение, т.е. формально можно считать, что решается не исходное уравнение с оператором A, а уравнение с некоторым другим оператором, слегка измененным относительно A.

Это изменение должно отвечать требованиям, с одной стороны, малости создаваемых таким образом искажений, а с другой — внесения достаточной априорной информации, чтобы задача стала математически корректной. В литературе нет четкого разграничения классов методов, в основе которых лежит идея искусственного изменения оператора. Однако за их частью, относящейся в основном к более ранней стадии исследования неустойчивых задач, довольно прочно закрепилось название «***метод квазиобращения***»[1]. Существует, вообще говоря, бесконечно много реализаций данного метода, поскольку для одной и той же некорректной задачи можно строить различные операторы квазиобращения. В частности, «***метод введения единичного оператора***» подразумевает замену $A(y)$ на $A(y) + \alpha \cdot y$, где α — некоторый малый параметр регуляризации [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 42, 43, 47]. Латтес и Лионс [Lattès and Lions, 1967] сформулировали метод квазиобращения для решения обратных эволюционных уравнений. К уравнению добавляется регуляризующий оператор с малым параметром, являющийся произведением исходного оператора на его сопряженный (для эволюционных дифференциальных уравнений этот оператор оказывается дифференциальным, поэтому в отечественной литературе для данного варианта метода квазиобращения можно встретить название «***метод введения дифференциального оператора***» — см., например, [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 47–51]). Малый параметр выбирается на основе специальным образом разработанных оптимальных оценок в решении [Марчук, 1980, с. 491].

Г.И. Марчуком и С.А. Атанбаевым разработан метод решения условно корректных задач эволюционного типа на основе применения метода минимальных невязок для всей пространственно-временной области определения решения. Регуляризация в этом методе производится за счет выбора оптимального числа шагов итерационного процесса на основе априорной оценки погрешностей во входных данных [Марчук, 1980, с. 491]. Конечно, как и всякий весьма общий способ, ***метод итераций*** применим не только к задачам эволюционного типа — использование этого метода для решения ИнУПеР см. в [Верлань и Сизиков, 1978, с. 205–208]. Впрочем, для решения ИнУПеР применяются и специальные методы[2], например интегрирование по частям, а для частного случая уравнений типа свертки — метод разложения искомой функции в ряд (в принципе, он может применяться и для других уравнений, но тогда его формулы становятся слишком сложны) [Верлань и Сизиков, 1978, с. 208–217, 220–221].

Одним из интересных подходов к НеЗ является применение понятий и методов теории вероятности. В наиболее полной форме такие исследования были развиты М.М. Лаврентьевым и В.Г. Васильевым[3]. В работах этого направления конструируются оптимальные в определенном смысле алгоритмы решения различных классов задач при некоторых предположениях о вероятностных свойствах как множества искомых решений, так и погрешностей входных данных [Марчук, 1980, с. 491]. Среди многочисленных ***методов статистической регуляризации*** упомяну обобщение метода преобразования Фурье (решение в статистическом ансамбле гладких функций), статистическую модификацию метода Филлипса-Тихонова (метод наиболее вероятного ансамбля), метод корреляционной матрицы [Верлань и Сизиков, 1978, с. 191–202], методы максимума энтропии, поиск байесовских решений, хотя, конечно, статистическая регуляризация перечисленными алгоритмами далеко не ограничивается [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 95–121].

Методы решения некорректно поставленных задач, в которых современные принципы

---

[1] Преображенский и Пикалов [1982, с. 47] отмечают, что достоинством метода является то обстоятельство, что при выборе структуры оператора, а также числовых значений некоторых параметров задачи часто удается использовать физические соображения об искомом решении, а не только более или менее формальные условия чисто математического характера (правда авторы пишут об этом в разд. «Метод введения дифференциального оператора» своей книги, из чего можно заключить, что данное утверждение относится лишь к данной частной модификации метода квазиобращения). На мой взгляд, использование физических соображений о решении пронизывает почти всю теорию решения некорректных задач. В частности, это является основой метода дескриптивной регуляризации. И даже в кажущейся «менее физичной» регуляризации Тихонова мы ведь выбираем регуляризующий оператор именно исходя из некоторых физических соображений, например, из того, что решение не может иметь резких скачков.

[2] В [Верлань и Сизиков, 1978, с. 276–277] приведена крайне полезная таблица, в которой для каждого типа ИнУПеР приведен метод и ссылка на реализующую его компьютерную программу (на языке АЛГОЛ-60).

[3] О постановке некоторых некорректных задач математической физики // Сиб. матем. ж., 1960, **VII**, № 3. — Цит. по [Марчук, 1980, с. 491, 524].

регуляризации органически сочетаются с качественной априорной информацией о решении (такой, как знакоположительность, монотонность, выпуклость, наличие экстремумов и т.д.), объединяются термином «***дескриптивная регуляризация***» [Воскобойников и др., 1984, с. 146]. Отмечу два весьма положительных свойства этого типа регуляризации. Во-первых, алгоритмическая реализация данного метода часто оказывается относительно простой (дискретизация задач, как правило, приводит всего лишь к проблеме нелинейного программирования со специфическими ограничениями в виде неравенств [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 122]). Во-вторых, другие рассмотренные выше методы не гарантированы от, пусть небольших, но абсолютно нефизических осцилляций (например, при восстановлении негладких функций — прямоугольной, треугольной, трапецеидальной формы — часто встречающихся в приложениях, регуляризованные решения даже при малом уровне шума могут содержать отрицательные значения и плохо восстанавливают «тонкую» структуру решения [Воскобойников и др., 1984, с. 146]). Подобных осцилляций при дескриптивной регуляризации не будет просто по определению — ведь система «дескриптивных» неравенств как раз и будет содержать соответствующие условия, например условие неотрицательности восстанавливаемой функции.

Очень удобной во многих отношениях оказалась ***проекционная схема Танабы-Хуанга***. Поскольку этот метод допускает введение самой разнообразной информации о решении (ограниченности, неотрицательности, монотонности и т.п. [Преображенский и Пикалов, 1982, с. 40–42]), то, хотя при первом знакомстве с ним может показаться, что данный алгоритм стоит несколько особняком от перечисленных выше общеизвестных групп методов решения некорректных задач, тем не менее, по-видимому, его можно отнести к дескриптивной регуляризации.

Пример решения некорректной обратной задачи идентификации мощности источника

Некорректную обратную задачу (и ее решение) рассмотрим на примере восстановления распределений скоростей образования газов в профиле почвы по экспериментальным измерениям газовых профилей (в лабораторных условиях). В [Орлов и др., 1987, с. 150–154][1]

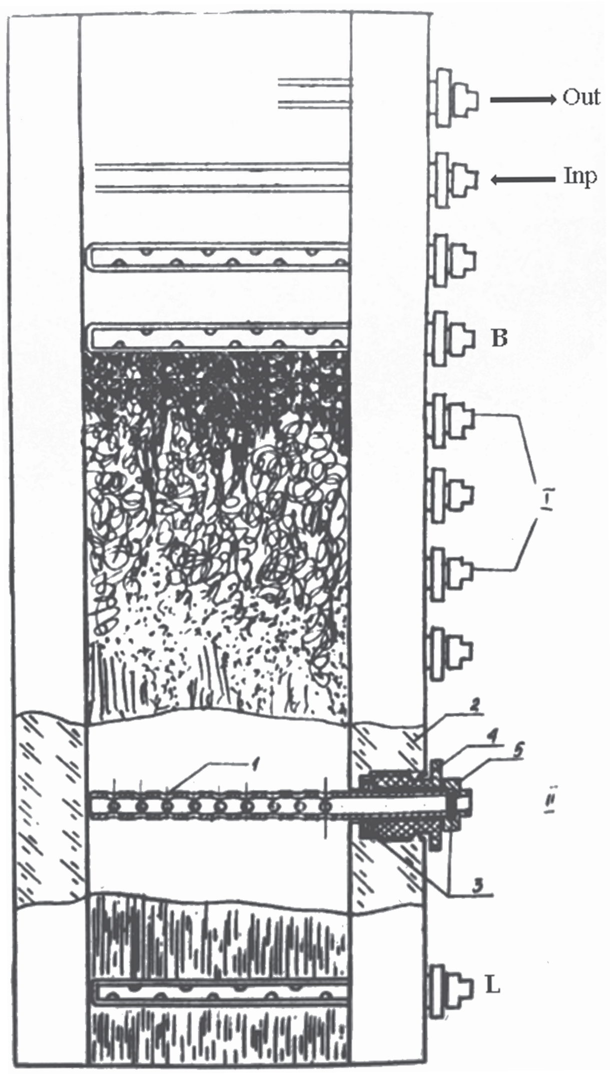

Рис. 1. Общий вид устройства, предназначенного для изучения в модельном эксперименте динамики газовых профилей почвы: I — Мембранные пробоотборники; II — схема крепления эффузатора мембранного пробоотборника в стенке сосуда: 1 — эффузатор (перфорированная трубка из хромированной стали), 2 — стенка сосуда, 3 — резиновая подкладка, 4 — тефлоновая герметизирующая гайка, 5 — стальная герметизирующая гайка.

эта задача решается при помощи «послойно-балансового способа» (ПоБаС). Для его реализации необходим специальный сосуд из оргстекла (с внутренними размерами 15 см × 15 см × 65 см). По всей высоте сосуда с шагом 5 см были установлены мембранные пробоотборники. В сосуд помещался насыпной монолит почвы высотой 35 см (таким образом верхние 5 пробоотборников находились выше слоя почвы, 6-й — на ее границе, а остальные оказались внутри монолита — см. рис. 1). Почву в сосуде затапливали, вносили источник углерода (глюкозу) и далее в динамике измеряли концентрации газов на разных глубинах, беря пробы из мембранных пробоотборников.

[1] В рукописи доклада ссылка на эту работу выглядела так: [Орлов и др., в печати]. Проконсультировавшись с автором, мы установили что это за работа и теперь даем правильную ссылку на нее. — ***Примечание издателей***.

Использовалась и другая модификация. Два самых верхних пробоотборника отсутствовали, а в отверстия для них вставлялись трубки: по одной из них в сосуд поступала газовая смесь, а по другой она выходила наружу. При исследовании аэробных процессов в качестве продувающей газовой смеси выступал атмосферный воздух. И, по-видимому, можно считать, что условия в таком сосуде ближе к природным, поскольку в воздухе над почвой не создается сверхвысоких концентраций продуктов почвенного дыхания. Но при исследовании анаэробных процессов продувку осуществляли инертным газом (аргоном или гелием), иногда содержащим примесь CO_2 (но не кислорода!). Далее будем рассматривать именно такую модификацию.

Рассмотрим конкретный пример. «Экспериментальные» данные[1] измерений концентрации CO_2 приведены на рис. 2 и в табл. 1. В [Орлов и др., 1987, с. 150] предполагается, что газообмен в монолите возможен только за счет диффузии. Поэтому уравнение динамики концентрации газа (f) в монолите будет таким:

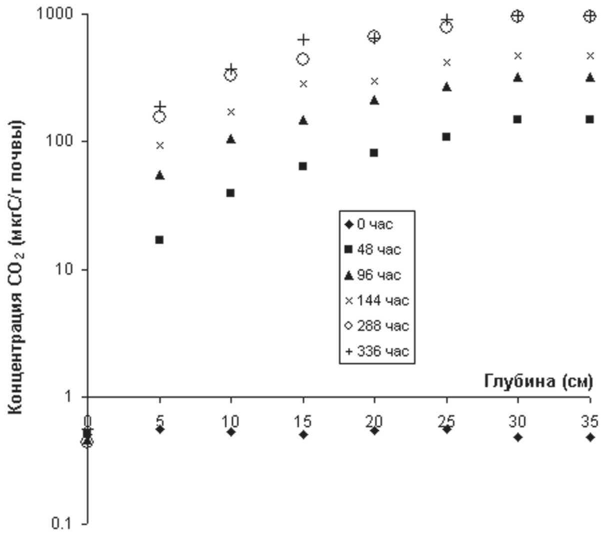

Рис. 2. Эволюция профиля концентраций CO_2 в почве течение 2 недель после внесения глюкозы (5 мг/г почвы). Поверхности почвы (т.е. глубине 0 см) соответствует пробоотборник «B» на рис. 1. Последний пробоотборник («*L*») соответствует глубине 30 см. На глубине 35 см (дно сосуда) пробоотборника не было и, исходя из условия непроницаемости границы, принималось равенство концентраций на глубинах 30 и 35 см. Вместо пробоотборников «Inp», «Out» вставлялись трубки, по которым, соответственно, в систему поступал и отводился воздух.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = y + D \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}, \qquad (2)$$

где D — эффективный коэффициент диффузии газа в почве; y — кажущаяся скорость образования газа, равная разности между реальными скоростями его образования и поглощения единицей объема почвы. Заменим пространственную производную в правой части уравнения ее конечно-разностным аналогом. Ограничимся простейшим приближением: рассмотрим систему трех последовательно расположенных одинаковых по мощности слоев почвы, которые обозначим номерами $i-1$, i и $i+1$. Пусть в них концентрации интересующего нас газа в момент времени t равны соответственно f_{i-1}, f_i и f_{i+1}.

Аппроксимация производной 2-го порядка на этих трех *пространственных* слоях [Калиткин, 1978, с. 71] даст приближенное уравнение динамики концентрации газа в i-ом слое:

$$\frac{df_i}{dt} \approx y_i + \frac{D}{h^2} \cdot (f_{i-1} - f_i) + \frac{D}{h^2} \cdot (f_{i+1} - f_i),$$

где h — мощность слоев; y_i — кажущаяся скорость образования газа в i-ом слое. Теперь сделаем следующий аналогичный шаг — аппрок-

[1] При ***разработке*** метода решения обратной задачи идентификации какой-либо величины y по f данные каких-либо ***реальных измерений*** f обычно использовать нельзя. Действительно, для них точное решение задачи не известно и мы не будем знать насколько хорошее или плохое решение для y получилось при помощи разработанного нами метода. Поэтому следует ***сгенерировать*** *псевдоэкспериментальные* данные: вычислить f, решив прямую задачу для какого-либо наперед заданного y_T, а потом на полученные f наложить случайный шум, смоделировав, тем самым, неизбежную зашумленность реальных экспериментальных данных. Вот по этим-то зашумленным данным следует идентифицировать y, решая обратную задачу. Качество полученного решения легко оценить, поскольку в идеале мы должны получить y_T.

В данном конкретном случае разработки алгоритма идентификации источника послойно-балансовым методом, я получил псевдоэкспериментальные данные следующим образом. Для функции $y_T(z,t) = (z/35) \cdot \exp(-0.00003 \cdot t_2 + 0.0087 \cdot t + 0.957)$ решалось уравнение (2) с $D = 0.02$ см^2/час, начальным условием $f(z,0) = 0.5$ мкг/см^3 и краевыми условиями $f(0,t) = 0.5$ мкг/см^3, $\partial f/\partial z|_{z\,=\,35\text{ см}} = 0$. Решение строилось конечно-разностным методом по программе № 0812 [Кошлак, 1973] на ЭВМ МИР-2 (для более точного решения задачи шаг дискретизации по z составлял 2.5 см, но на печать выводились только значения решения при $z = 0$, 5, 10, 15, 20, 25, 30 см, т.е. лишь те, которые мог получить экспериментатор при реальных измерениях, т.к. пробоотборники были размещены с шагом 5 см). Для получения псевдоэкспериментальных данных $f_{PE}(z,t)$ на полученное решение накладывался Гауссов шум по следующему правилу: $f_{PE}(z,t) = f(z,t) \cdot (1 + r \cdot a)$, где r — случайные числа из [Соболь, 1973, с. 296], a — средняя относительная погрешность измерений (я принимал $a = 0.1$).

симируем конечными разностями производную по времени. Для этого нам кроме $f_i = f_i(t)$ теперь понадобится $f_i(t - \Delta t)$ — концентрация газа в i-ом слое в предыдущий момент времени, отстоящий от t на Δt.

Тогда аппроксимация производной 1-го порядка на двух *временн**ых*** слоях [Калиткин, 1978, с. 71] даст приближенное конечно-разностное уравнение динамики концентрации газа в i-ом слое:

$$\frac{f_i - f_i(t-\Delta t)}{\Delta t} \approx y_i + \frac{D}{h^2}\cdot(f_{i-1} - f_i) + \frac{D}{h^2}\cdot(f_{i+1} - f_i).$$

Отсюда легко выразить y_i:

$$y_i \approx \frac{f_i - f_i(t-\Delta t)}{\Delta t} - \frac{D}{h^2}\cdot(f_{i-1} - f_i) - \frac{D}{h^2}\cdot(f_{i+1} - f_i) \quad (3)$$

и задачу восстановления распределений скоростей образования газов в профиле почвы по экспериментальным измерениям концентраций газов формально можно считать решенной. Однако, подчеркну, лишь ***формально***. Полученное решение — плохое!

К сожалению, из-за необъяснимой поспешности подачи работы [Орлов и др., 1987] в печать, математическое оформление ПоБаС в этой статье не было нами «доведено до ума». Очевидно, что из-за операций дифференцирования экспериментальных (отягощенных погрешностями) данных, метод расчета в виде (3)[1] представляет собой типичную некорректную задачу. Для простоты рассмотрим сейчас только конечно-разностную аппроксимацию первой производной

$$\mathrm{d}f_i/\mathrm{d}t \approx [f_i(t) - f_i(t-\Delta t)]/\Delta t. \quad (4)$$

На равномерной сетке для априорной оценки точности формул часто применяют способ разложения по формуле Тейлора-Маклорена [Калиткин, 1978, с. 74]. Применим этот метод к (4):

$$f_i(t-\Delta t) = f_i(t) - \Delta t\cdot \mathrm{d}f_i/\mathrm{d}t + 0.5\cdot\Delta t^2\cdot \mathrm{d}^2 f_i/\mathrm{d}t^2|_{t=\eta}, \quad (5)$$

где η — некоторая точка интервала $(t - \Delta t,\ t)$. Отсюда получаем

$$\mathrm{d}f_i/\mathrm{d}t = [f_i(t) - f_i(t-\Delta t)]/\Delta t + 0.5\cdot\Delta t\cdot \mathrm{d}^2 f_i/\mathrm{d}t^2|_{t=\eta},$$

следовательно, погрешность приближенного выражения производной (4) составляет

$$\delta_1 = 0.5\cdot\Delta t\cdot \mathrm{d}^2 f_i/\mathrm{d}t^2|_{t=\eta}. \quad (6)$$

Как видим, эта погрешность уменьшается при уменьшении Δt. Однако все эти рассуждения верны лишь для точных значений $f_i(t)$ и $f_i(t - \Delta t)$. Но точных значений мы не знаем. И принципиально (!!!) не можем узнать.

Вообще, при численном дифференцировании таблично заданной функции возникают погрешности двух типов: во-первых, погрешность, которая вызывается заменой функции интерполяционным многочленом, и, во-вторых, погрешность, которая вызывается неточным заданием исходных значений [Копченова и Марон, 1972]. Калиткин [1978, с. 81–82] называет их, соответственно, ***погрешностью метода*** и ***неустранимой погрешностью***. Из (5) и (6) очевидно, что δ_1 — погрешность метода. Неустранимую погрешность (НеП) я буду далее обозначать через δ_2.

Понятно, что провести вычисления по (4) невозможно, ибо, как уже было сказано выше, мы не знаем (и никогда не сможем узнать) точные значения $f_i(t)$ и $f_i(t - \Delta t)$. Единственное, что нам известно — приближенные (экспериментально измеряемые) концентрации $c_i(t) = f_i(t) + \varepsilon_1$ и $c_i(t - \Delta t) = f_i(t - \Delta t) + \varepsilon_2$. Следовательно, на практике вместо (4) мы можем вычислить лишь аналогичное ему выражение

$$\mathrm{d}c_i/\mathrm{d}t \approx [c_i(t) - c_i(t-\Delta t)]/\Delta t =$$
$$= [f_i(t) + \varepsilon_1 - f_i(t-\Delta t) - \varepsilon_2]/\Delta t =$$
$$= [f_i(t) - f_i(t-\Delta t)]/\Delta t + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\Delta t. \quad (7)$$

К сожалению, значения ε_1 и ε_2 нам не известны, поэтому (для гарантии) приходится ориентироваться на самый худший случай. Очевидно, что если погрешность индивидуального измерения концентрации не превышает ε, то ***для погрешности разности концентраций*** в наихудшей ситуации будем иметь $2\cdot\varepsilon$ — в том случае, когда, например, $c_i(t)$ отличается от точного значения $f_i(t)$ на $+\varepsilon$, а $c_i(t - \Delta t)$ от $f_i(t - \Delta t)$ — на $-\varepsilon$. Тогда, продолжая (7), получаем

$$\mathrm{d}c_i/\mathrm{d}t \approx [f_i(t) - f_i(t-\Delta t)]/\Delta t + 2\cdot\varepsilon/\Delta t =$$
$$= \mathrm{d}f_i/\mathrm{d}t + \delta_1 + 2\cdot\varepsilon/\Delta t.$$

Как было показано выше — см. (6) — погрешность метода (δ_1) содержит шаг расчета (Δt) в положительной степени, поэтому при уменьшении Δt эта погрешность, как правило, уменьшается. Но НеП ($\delta_2 = 2\cdot\varepsilon/\Delta t$), вызванная неточным заданием исходных значений [Копченова и Марон, 1972] концентраций, обратно пропорциональна Δt. Именно здесь мы

[1] В [Орлов и др., 1987, с. 150] использована более сложная конечно-разностная аппроксимация производной, поэтому результирующая формула для вычисления y_i там другая. Но, по большому счету, это ничего не меняет, поскольку дифференцирование экспериментальных данных все равно остается некорректным. Сейчас я использую более простые формулы лишь для того, чтобы более наглядно показать проблему и пути ее решения, не закопавшись в ненужных для сути дела выкладках.

DOI: doi.org/10.17816/edgcc90123

сталкиваемся с некорректностью.

Действительно, ***при уменьшении шага*** Δt ***неустранимая погрешность увеличивается*** [Копченова и Марон, 1972]. Пока шаг достаточно велик, при его убывании НеП мала по сравнению с погрешностью метода; поэтому полная погрешность[1] убывает. При дальнейшем уменьшении шага неустранимая погрешность становится заметной, что проявляется в не вполне регулярной зависимости результатов вычислений от величины шага. Наконец, при достаточно малом шаге НеП становится преобладающей, и при дальнейшем уменьшении шага результат вычислений становится все менее достоверным [Калиткин, 1978, с. 82]. Отсюда следует, что можно найти некоторое оптимальное значение шага (как это сделать — см., например, в [Калиткин, 1978, с. 82]), при котором производная вычисляется с наибольшей точностью, принципиально возможной при данном значении ε. Однако в нашем случае это ничего не даст. Разумеется, мы можем отбирать пробы практически в любые моменты времени и обеспечить оптимальный шаг Δt для вычисления производной по времени. Но не стоит забывать, что (3) содержит еще конечно-разностную аппроксимацию производной (2-го порядка) по пространственной координате — ср. (3) и (2). А вот пространственный шаг h мы изменить не можем — он определяется расположением пробоотборников — см. рис. 1. Выход может быть найден с помощью построения регуляризованного решения[2].

Решение будем искать методом частичной регуляризации 1-го порядка. В этом методе вводится регуляризующий функционал

$$\Phi_\alpha = \int_c^d [A(y) - f(x)]^2 dx + \alpha \int_a^b \left(\frac{dy}{ds}\right)^2 ds, \tag{8}$$

где α — параметр регуляризации. Решение y ищется из условия минимума функционала. Такое решение, доставляющее функционалу минимум, обозначим y_α [Верлань и Сизиков, 1978, с. 143, 157], подчеркнув тем самым, что это решение соответствует некоторому определенному значению α.

Полученная выше формула (3) дает «обратную» зависимость $y = A^{-1}(f)$. Но, как видим, для построения функционала Φ_α нужна «прямая» зависимость $f = A(y)$. С первого взгляда может показаться, что ее очень просто получить, выразив f_i из (3). Но попытавшись это сделать, мы увидим, что, поскольку концентрация в i-ом слое связана уравнением с концентрациями в $(i - 1)$-ом и в $(i + 1)$-ом слоях:

$$-D \cdot \Delta t \cdot f_{i-1} + (h^2 + 2 \cdot D \cdot \Delta t) \cdot f_i - D \cdot \Delta t \cdot f_{i+1} \approx \approx y_i \cdot \Delta t \cdot h_2 + \cdot f_i (t - \Delta t) \cdot h_2, \tag{9}$$

то для получения значения концентрации в i-ом слое нам необходимо решить ***систему*** уравнений. Система эта будет состоять из однотипных уравнений (9) для всех слоев кроме первого и последнего (n-го), для которых уравнения будут гораздо проще, ибо записываются на основании граничных условий. В первом слое это будет какое-то конкретное значение (p), полученное из измерений:

$$f_1 = p, \tag{10}$$

а для последнего слоя на основании условия непроницаемости нижней границы принимается:

$$f_n = f_{n-1}. \tag{11}$$

Решить систему, конечно, несколько сложнее, нежели одно уравнение, но в этом есть и положительный момент — в результате мы получим не одно значение f_i, а концентрации сразу для всех слоев: $f_1, f_2, ..., f_n$. Проделаем это на примере.

В табл. 1 приведена часть «экспериментальных» данных, соответствующих измерениям на 7 глубинах через 192 и 240 час. после начала эксперимента. Итак, h = 5 см, Δt = 240–192 = 48 час., пусть, кроме того, известно, что коэффициент диффузии для CO_2 в изучаемой почве составляет 0.02 см²/час (следовательно, $h^2 = 5^2 = 25$ см², $\Delta t \cdot h^2 = 48 \cdot 25 = 1200$ час · с м², $D \cdot \Delta t = 0.02 \cdot 48 = 0.96$ см², $h^2 + 2 \cdot D \cdot \Delta t = 25 + 2 \cdot 0.02 \cdot 48 = 26.92$ см²). Запишем систему уравнений (9)–(11):

$$f_1 = 0.56,$$

$$-0.96 \cdot f_1 + 26.92 \cdot f_2 - 0.96 \cdot f_3 = 1200 \cdot y_2 + 25 \cdot 133.12,$$

$$-0.96 \cdot f_2 + 26.92 \cdot f_3 - 0.96 \cdot f_4 = 1200 \cdot y_3 + 25 \cdot 259.33,$$

$$-0.96 \cdot f_3 + 26.92 \cdot f_4 - 0.96 \cdot f_5 = 1200 \cdot y_4 + 25 \cdot 360.77,$$

$$-0.96 \cdot f_4 + 26.92 \cdot f_5 - 0.96 \cdot f_6 = 1200 \cdot y_5 + 25 \cdot 593.33,$$

$$-0.96 \cdot f_5 + 26.92 \cdot f_6 - 0.96 \cdot f_7 = 1200 \cdot y_6 + 25 \cdot 674.98,$$

$$-0.96 \cdot f_6 + 26.92 \cdot f_7 - 0.96 \cdot f_8 = 1200 \cdot y_7 + 25 \cdot 634.17,$$

$$f_7 = f_8.$$

Подставляя сюда набор конкретных значений скоростей образования CO_2 ($y_2, y_3, ..., y_7$) в слоях, можно (решив эту систему) получить концентрации $f_2, f_3, ..., f_8$, соответствующие дан-

[1] Полная погрешность мажорируется суммой $\delta_1 + \delta_2$ [Калиткин, 1978, с. 82].

[2] Кстати говоря, способ определения оптимального шага и запрещение вести расчет с шагом меньше оптимального тоже есть некоторый способ регуляризации дифференцирования, так называемая регуляризация по шагу. Этот способ давно применялся физиками [Калиткин, 1978, с. 83].

DOI: doi.org/10.17816/edgcc90123

Таблица 1. Вычисление скорости образования газа в почве различными вариантами ПоБаС.

Глубина (см)	Концентрация CO_2 (f, мкг/см^3) через		Скорость образования CO_2 (y, мкг/см^3/ч) через 240 ч				
			истинная	рассчитанная ПоБаС			
				обычным	с регуляризацией		
					0-го порядка	частичной 1-го порядка	
	192 ч	240 ч				без ограничений	с ограничением $y \geq 0$
0	0.44	0.56	0		0	0.4747	0.2386
5	133.12	134.88	0.5332	0.0425	0.0237	0.4273	0.2237
10	259.33	261.91	1.0664	0.0287	0.0389	–0.1046	0.0655
15	360.77	420.28	1.5995	1.3231	0.6643	1.027	1.1181
20	593.33	474.57	2.1327	–2.6278	–1.3684	–0.7373	0.0000
25	674.98	720.93	2.6659	0.9664	0.5943	2.505	1.9762
30	634.17	955.93	3.1990	6.8913	4.5030	4.892	5.1531
35	634.17	955.93	3.7322		0	5.082	5.4419
Нормированная СКО* (мкг^2/см^6/ч^2):				6.76	4.30	1.86	1.64

***Примечание**: сумма квадратов отклонений (скорости образования CO_2, вычисленной разными методами, от истинной скорости образования), деленная на количество пространственных узлов, в которых эти отклонения вычисляются; поскольку обычный ПоБаС не дает значения скорости в первом и последнем пространственных узлах, то получаемое в этом случае значение СКО делится на 6 (в остальных случаях делится на 8).

ным скоростям. Например, если y_i были рассчитаны в соответствии с обычным послойно-балансовым способом на основе формулы (3) по данным столбцов «Концентрация CO_2...» табл. 1 (эти y_i см. в столбце «Скорость образования CO_2...»)[1], то их подстановка в вышеприведенную СЛАУ даст те f_i, которые находятся в столбце «240 ч» табл. 1. Но эти значения y_i, скорее всего, не обеспечат минимум функционала (8). Так что теперь насущной задачей становится задача минимизации. Однако прежде нужно записать (8) в более конкретной форме — приспособленной для практических вычислений.

[1] На всякий случай, чтобы все было кристально ясно, доведу один расчет «до числа». Например, если мы хотим определить скорость образования CO_2 на глубине 5 см спустя 240 ч после начала эксперимента (при том, что предыдущее измерение концентрационного профиля было выполнено спустя 192 ч после начала), то, согласно табл. 1, параметры формулы (3) будут иметь следующие значения: $\Delta t = 240 - 192 = 48$ ч, $h = 5$ см, $f_i = 134.88$ мкг/см^3, $f_{i-1} = 0.56$ мкг/см^3, $f_{i+1} = 261.91$ мкг/см^3, $f_{i(t-\Delta t)} = 133.12$ мкг/см^3. Пусть коэффициент диффузии CO_2 в исследуемой почве в условиях данного эксперимента составил $D = 0.02$ см^2/ч. Тогда по формуле (3) имеем:

$$y = (134.88 - 133.12)/48 - 0.02/5^2 \cdot (0.56 - 2 \cdot 134.88 + 261.91) \approx 0.04250 \text{ мкг} \cdot \text{час}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}.$$

Записывая такую формулу для Φ_α в приложении к рассматриваемой задачи, учтем два обстоятельства:

- и концентрации (f), и скорости образования газа (y), и, соответственно, градиент этой скорости (dy/dz) заданы в одной и той же области пространства — в толще почвы, наполняющей экспериментальный сосуд (рис. 1); поэтому области определения этих функций совпадают, и в (8) $x = s = z$, $a = c$, $b = d$, т.е. оба интеграла берутся по одной и той же области в одних и тех же пределах; пусть поверхность почвы соответствует 0, тогда $b = d$ — толщина слоя почвы в сосуде (конкретно в нашем эксперименте $b = 35$ см), следовательно,

$$\Phi_\alpha = \int_0^{35} \left\{ [A(y) - f(z)]^2 + \alpha \cdot \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 \right\} dz =$$

$$= \int_0^{35} \left[g(z) + \alpha \cdot \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 \right] dz,$$

- где для краткости введено обозначение $g(z) = [A(y) - f(z)]^2$, смысл которого состоит в том, что g — это квадрат разности двух концентраций для каждой глубины z: во-первых, концентрации, рассчитанной путем решения СЛАУ — это $A(y)$ — и, во-вторых, реально измеренной в эксперименте, т.е. f);

- экспериментально измеряются значения f только в 7 точках 0, 5, 10, 15, 20, 25 и 30 см, кроме того, еще в 8-й точке (при z = 35 см) можно, исходя из условия непроницаемости сосуда, принять $f(35) = f(30)$; поэтому следует использовать дискретную аппроксимацию интеграла, в частности, можно использовать формулу трапеций (см., например, [Калиткин, 1978, с. 87]):

$$\Phi_\alpha = \int_0^{35} \left[g(z) + \alpha \cdot \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 \right] dz \approx$$

$$\approx h \cdot \left\{ \frac{g(0) + g(35)}{2} + \sum_{i=1}^{6} g(i \cdot h) + \alpha \cdot \left[\frac{\left(\left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=0} \right)^2 + \left(\left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=35} \right)^2}{2} + \sum_{i=1}^{6} \left(\left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=i \cdot h} \right)^2 \right] \right\}, \quad (12)$$

где h = 5 см. Для производных тоже следует взять дискретные аппроксимации. Если ограничиться погрешностью аппроксимации $O(h^2)$, то в первой, последней и во всех промежуточных точках можно использовать, соответственно, следующие формулы (см., например, [Березин и Жидков, 1966, с. 162]):

$$\left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=0} \approx \frac{-3 \cdot y_1 + 4 \cdot y_2 - y_3}{2 \cdot h},$$

$$\left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=35} \approx \frac{3 \cdot y_8 - 4 \cdot y_7 + y_6}{2 \cdot h}, \qquad \left. \frac{dy}{dz} \right|_{z=i \cdot h} \approx \frac{y_{i+2} - y_i}{2 \cdot h},$$

Теперь очевидно, что полученное выражение (12) — это, по сути дела, всего лишь функция (а не функционал). Эта функция зависит от 8 переменных (y_1, y_2, ..., y_8) и нам надо подобрать такие значения эти переменных, при которых функция $\Phi_\alpha(y_1, y_2, ..., y_8)$ имела бы минимум. Однако, прежде чем решать задачу минимизации, есть смысл попытаться заменить Φ_α более простой функцией (обозначим ее ϕ_α), которая имела бы минимум там же, где и Φ_α. Понятно, что множитель h = 5 см никак на положение минимума вли-

Таблица 2. Программы для минимизации функций нескольких переменных*.

Название	Язык	Метод	Литературный источник
Минимизация без ограничений			
D3MINF	FORTRAN-IV	Спуска по координатам	[Белявский и др., 1979]
SIMPLEX	FORTRAN IV	Нелдера-Мида	[Himmelblau, 1972, Appendix B]
MINI	FORTRAN IV	Дэвидона-Флетчера-Пауэлла, проективного Ньютона, Ньютона, Бройдена, Пирсона 2, Пирсона 3, Голдштейна-Прайса, Флетчера-Ривса	[Himmelblau, 1972, Appendix B]
DIRECT	PL/1	Прямого поиска (или конфигураций)	[Агеев и др., 1981, с. 60–66, 162–163]
б/н	Алгол-60	Симплексный	[Кафаров и др., 1972, с. 387–388, 391–392]
б/н	Алгол-60	Сканирования	[Кафаров и др., 1972, с. 387, 389–390]
б/н	Алгол-60	Случайного спуска	[Кисляков, 1969]
б/н	Алгол-60	Случайных направлений с обратным шагом	[Кафаров и др., 1972, с. 388, 393–395]
б/н	АНАЛИТИК-71	Градиентный + Ньютона	[Гущина, 1979]
Минимизация с ограничениями			
FLEXIPLEX	FORTRAN IV	Скользящего допуска	[Himmelblau, 1972, Appendix B]
RNDMIN	FORTRAN-5	Случайного поиска	[Мироненко и Пачепский, 1980, с. 61–63]

***Примечание:** приведены только программы для функций общего вида (т.е., например, «за бортом» остались алгоритмы задач линейного программирования, оптимизации на графах и др.) и лишь на языках высокого уровня (т.е. не упоминаются программы на Ассемблере, ЯМК-21 и т.п.).

ять не будет, следовательно, его можно просто откинуть. Кроме того, легко заметить, что в силу условия (10), рассчитанное из решения СЛАУ значение f_1 всегда будет совпадать с измеренным значением концентрации в поверхностном слое почвы. Иначе говоря, $A(y)$ будет в точности совпадать с $f(0)$ при $z = 0$, поэтому $g(0) = 0$. Следовательно, вместо Φ_α можно минимизировать чуть более простую функцию:

$$\phi_\alpha \approx \frac{g(35)}{2} + \sum_{i=1}^{6} g(i \cdot h) + \alpha \times \\ \times \left[\frac{(3 \cdot y_1 - 4 \cdot y_2 + y_3)^2 + (3 \cdot y_8 - 4 \cdot y_7 + y_6)^2}{8 \cdot h^2} + \sum_{i=1}^{6} \left(\frac{y_{i+2} - y_i}{2 \cdot h} \right)^2 \right]. \qquad (13)$$

Эта функция (как и Φ_α) имеет одну особенность, которая немного усложняет работу с ней. Для каждого набора значений $y_1, y_2, ..., y_8$ мы не можем сразу вычислить $\phi_\alpha(y_1, y_2, ..., y_8)$ — необходимо сначала решить СЛАУ (9)–(11), на основании чего можно будет вычислить значения $g(i \cdot h)$. Впрочем, технически это все сделать не так уж и сложно — см. программу в Приложении. Для минимизации функций нескольких переменных предложено множество алгоритмов (см., например, [Rosenbrock and Storey, 1966, chapter 4; Бояринов и Кафаров, 1969; Безденежных, 1973, с. 158–190; Калиткин, 1978, с. 203–215; Bazaraa and Shetty, 1979; Shoup, 1979, chapter 7; Gill et al., 1981; Димитров, 1982, с. 214–231; Полак и др., 1984, с. 163–166, Бирюков и Кантере, 1985, с. 23–32]) для некоторых из которых в литературе можно найти программные реализации — табл. 2. Таким образом, задачу минимизации $\phi_\alpha(y_1, y_2, ..., y_8)$ можно было бы считать решенной, однако, эта функция зависит от параметра α, значение которого нам пока не известно.

Наиболее употребительный метод, согласно которому выбирается значение α — это «способ невязки»: значение α выбирается из условия

$$H = \Big| \| Ay_\alpha - f \| - \Delta f - \zeta \Big| \to \min,$$

где ζ — ошибка аппроксимации оператора (в ранних работах принималось, что $\zeta = 0$); Δf — ошибка задания $f(x)$:

$$\Delta f = \left\| f(x) - f_{PE}(x) \right\| = \sqrt{\int_c^d [f(x) - f_{PE}(x)]^2 \, dx}$$

здесь f, f_{PE} — соответственно, точная правая часть и ее практическое задание [Верлань и Сизиков, 1978, с. 143, 172, 179].

Таким образом, вычислительный процесс регуляризации ПоБаС можно организовать следующим образом. Прежде всего необходимо задаться положительной величиной ΔH — допустимой погрешностью выполнения равенства

$$\|Ay_\alpha - f\| = \Delta f + \zeta.$$

1) Полагаем $\alpha_L = 0$, и выбираем произвольное достаточно большое значение $\alpha_R > 0$, такое, что $\| Ay_\alpha(\alpha_R) - f\| > \zeta + \Delta f$ (понятно, что для нахождения $\| Ay_\alpha(\alpha_R) - f\|$ нам придется решить задачу минимизации ϕ_α).

2) Полагаем $\alpha = (\alpha_L + \alpha_R)/2$.

3) Решаем задачу минимизации $\phi_\alpha(y_1, y_2, ..., y_8)$, в результате чего получаем набор значений $y_1, y_2, ..., y_8$, обеспечивающих минимум ϕ_α. Используя эти значения, вычисляем $H_1 = \| Ay_\alpha - f\|$.

4) Если $|H_1 - \Delta f - \zeta| \le \Delta H$, то идем к п. 7.

5) Если $H_1 < \zeta + \Delta f$, то полагаем $\alpha_L = \alpha$ и идем к п. 2.

6) Полагаем $\alpha_R = \alpha$ и идем к п. 2.

7) КОНЕЦ.

В табл. 1 (столбец «без ограничений») приведены результаты, полученные по этому алгоритму. Поскольку истинное распределение источников CO_2 в почве в данном случае нам известно, можно сравнить получающиеся результаты с этим распределением и сделать вывод о точности метода. В качестве меры отклонения восстановленного распределения источников от истинного удобно использовать нормированную СКО — см. примечание к табл. 1. Прежде всего хочу обратить внимание на то, что для обычного ПоБаС (столбец «обычным») это отклонение оказалось весьма большим: 6.76 мкг^2/см^6/ч^2. Очевидно, что нормированная СКО может рассматриваться в качестве квадрата характерного значения отклонения измеренной мощности источника от истинной (т.е. квадрата абсолютной погрешности). Учитывая, что максимальное значение истинной мощности достигается на глубине 35 см и составляет ≈ 3.73 мкг/см^3/ч, получаем, что отклонение $(6.76)^{1/2} \approx 2.6$ мкг/см^3/ч даже в этом случае составляет $2.6 \cdot 100\%/3.73 \approx 70\%$, что уж говорить о других глубинах, где мощность источника меньше, следовательно ее относительная ошибка будет еще больше. Разобранный выше метод с частичной регуляризацией 1-го порядка дал гораздо более хороший результат: нормированная СКО составила 1.86 мкг^2/см^6/ч^2, что соответствует характерному значению абсолютной погрешности $(1.86)^{1/2} \approx 1.36$ мкг/см^3/ч. Существуют и другие методы регуляризации. Они могут давать как более, так и менее хорошие результаты, чем приведенный выше. Для сравнения решим ту же самую задачу методом регуляризации Тихонова 0-го порядка.

В этом методе решение y ищется из условия минимума следующего регуляризующего функционала

$$\Phi_\alpha = \int_c^d [Ay - f(x)]^2 dx + \alpha \int_a^b y(s)^2 ds$$

[Верлань и Сизиков, 1978, с. 144]. Проводя дискретизацию аналогично тому, как это было сделано выше, получаем

$$\Phi_\alpha = \int_0^{35} [g(z) + \alpha \cdot y(z)^2] dz \approx$$

$$h \cdot \left[\frac{g(0)+g(35)}{2} + \sum_{i=1}^{6} g(i \cdot h) + \alpha \cdot \left(\frac{y_1{}^2 + y_8{}^2}{2} + \sum_{i=1}^{6} y_{i+1}{}^2 \right) \right]. \quad (14)$$

Но, записывая для данного случая упрощенную функцию ϕ_α, кроме того, что было учтено при переходе от (12) к (13), следует учесть еще одно очевидное обстоятельство: поскольку в систему (9)–(11) y_1 и y_8 не входят, то f_i от них не зависят, или, иначе говоря, g не зависит от y_1 и y_8. Следовательно, как видно из (14), $\Phi_\alpha \sim y_1{}^2 + y_8{}^2$, т.е. минимальное значение Φ_α будет соответствовать значениям $y_1 = y_8 = 0$. Таким образом, значениям y_1 и y_8 мы уже нашли, а ϕ_α будет функцией не 8, а только 6 переменных (y_2, y_3, ... y_7):

$$\phi_\alpha \approx \frac{g(35)}{2} + \sum_{i=1}^{6} [g(i \cdot h) + \alpha \cdot y_{i+1}{}^2].$$

Результаты расчетов описываемым методом приведены в табл. 1 (столбец «0-го порядка»). Нормированная СКО не слишком хороша — она составила 4.30 мкг^2/см^6/ч^2, что соответствует характерному значению абсолютной погрешности $(4.3)^{½} \approx 2.07$ мкг/см^3/ч. Более того, хочу обратить внимание на то, что на глубине 20 см имеем $y \approx -1.4$ мкг/см^3/ч < 0, что по физическому смыслу соответствует ***потреблению*** CO_2. Кстати, отрицательные значения y выявлялись и при работе методом частичной регуляризации 1-го порядка (правда, тогда они были существенно меньше). Может ли быть существенное поглощение CO_2 на глубине 20 см? Впрочем, в данном случае, это вопрос совершенно не существенный. Ведь мы знаем, каковы истинные скорости продукции CO_2 (см. столбец «истинная» табл. 1) и, таким образом, нам точно известно, что отрицательные значения — артефакт.

Конечно, в условиях реальных измерений точное значение продукции нам не известно, но предположим, что какие-то биологические соображения позволяют нам считать, что возможна лишь продукция, а не потребление CO_2. Тогда для решения задачи идентификации мощности источника можно применить дескриптивную регуляризацию. В данном случае это выразится в том, что на обычную регуляризацию следует наложить условия неотрицательности y:

$$y_1 \ge 0, \quad y_2 \ge 0, \quad y_3 \ge 0, \quad y_4 \ge 0,$$
$$y_5 \ge 0, \quad y_6 \ge 0, \quad {}_7 \ge 0, \quad y_8 \ge 0. \quad (15)$$

В частности, можно минимизировать (13) при условиях (15). Результат решения такой задачи представлен в табл. 1 (столбец «с ограничением $y \ge 0$»). Нормированная СКО оказалась наименьшей среди всех рассмотренных нами методов: она составила 1.64 мкг^2/см^6/ч^2, что соответствует характерному значению абсолютной погрешности $(1.64)^{½} \approx 1.28$ мкг/см^3/ч.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарность выдающемуся советскому микробиологу Николаю Сергеевичу Паникову, предложившему подготовить доклад на данную тему и убедившему его, что это может оказаться полезным для современных почвоведов и микробиологов. Особая благодарность талантливому почвоведу Олегу Игоревичу Минько, консультировавшему автора по техническим деталям послойно-балансового метода (несколько полезных консультаций по этому же вопросу было получено и от хроматографиста С.В. Каспарова).

ПРИЛОЖЕНИЕ[1]

```
PROGRAM  MINKO1
C  ПРИМЕР  ИСПОЛЬЗОВАНИЯ  УКОРОЧЕННОЙ  ВЕРСИИ  ПОДПРОГРАММЫ  POISK4
C  (ТОЛЬКО  ДЛЯ  МНОГОМЕРНОЙ  -  НЕ  ОДНОМЕРНОЙ  -  МИНИМИЗАЦИИ)
C  *******************************************************************
C  СЛЕДУЮЩИЕ  ДАННЫЕ  ЗАДАЮТСЯ  ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ
C  ALPHA               -  ПАРАМЕТР  РЕГУЛЯРИЗАЦИИ
C  D  (КВ.СМ/ЧАС)      -  КОЭФФИЦИЕНТ  ДИФФУЗИИ  ГАЗА  В  ПОЧВЕ
C  DT  (ЧАС)           -  ВРЕМЯ,  ПРОШЕДШЕЕ  ОТ  ПРЕДЫДУЩЕГО  ИЗМЕРЕНИЯ  ДО  ТЕКУЩЕГО
C  H    (СМ)           -  РАССТОЯНИЕ  МЕЖДУ  ПРОБООТБОРНИКАМИ  (ПО  ГЛУБИНЕ)
C  T0(МКГ/КУБ.СМ)-ИЗМЕРЕННЫЕ  КОНЦЕНТРАЦИИ  ГАЗОВ  В  ПРЕДЫДУЩИЙ  МОМЕНТ  ВРЕМЕНИ
C  T1(МКГ/КУБ.СМ)-ИЗМЕРЕННЫЕ  КОНЦЕНТРАЦИИ  ГАЗОВ  В  ТЕКУЩИЙ  МОМЕНТ  ВРЕМЕНИ
C  ОПИСАНИЕ  X,N,DX,EPS,FM,NFE,FUN,OUT  СМ.  В  ОПИСАНИИ  SUBROUTINE  POISK4.
C
C  ПРИ  РЕШЕНИИ  КОНКРЕТНОЙ  ЗАДАЧИ  ТАКЖЕ  НУЖНО  ИЗМЕНИТЬ  РАЗМЕРНОСТИ
C  МАССИВОВ  (КАК  В  ГОЛОВНОЙ  ПРОГРАММЕ,  ТАК  И  В  SUBROUTINE  POISK4)
C
C  РЕШЕНИЕМ  ЯВЛЯЕТСЯ  ВЕКТОР  X  ЭЛЕМЕНТЫ  КОТОРОГО  (МКГ/КУБ.СМ/ЧАС)  –  РЕГУЛЯ-
C  РИЗОВАННЫЕ  ЗНАЧЕНИЯ  СКОРОСТИ  ОБРАЗОВАНИЯ  ГАЗА  ПО  ГЛУБИНЕ  С  ШАГОМ  H
C  *******************************************************************
      DIMENSION  DX(8),T0(8),T1(8),X(8)
      EXTERNAL  FUN,OUT
      DATA  ALPHA/69000.0/,  N/8/,  EPS/1.E-5/,  FM/0./,  NFE/500/
      DATA  D,  DT,  H  /0.02,  48.0,  5.0/
      DATA  T0/.44,  133.12,  259.33,  360.77,  593.33,  674.98,634.17,634.17/
      DATA  T1/.56,  134.88,  261.91,  420.28,  474.57,  720.93,955.93,955.93/
C  КОНЕЦ  БЛОКА  ДАННЫХ,  ЗАДАВАЕМЫХ  ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ
      COMMON  /COBLO0/  T0,  COMMON  /COBLO1/  T1,  COMMON  /COBLO2/  ALPHA,D,DT,H,N
C
C  НАЧАЛЬНОЕ  ПРИБЛИЖЕНИЕ,  ВЫЧИСЛЕННОЕ  ПОСЛОЙНО-БАЛАНСОВЫМ  МЕТОДОМ
      X(1)=0.0
      DO  407  I=2,N-1
      X(I)=(T1(I)-T0(I))/DT-(T1(I-1)-2*T1(I)+T1(I+1))*D/H/H
407   DX(I)=0.1*X(I)
      X(N)=X(N-1)
      DX(N)=0.1*X(N-1)
      DX(1)=DX(N)
      PRINT  410,  X(1),  X(2),  X(3),  X(4)
410   FORMAT(4X,  E12.5,  1H,  E12.5,  1H,  E12.5,  1H,  E12.5)
      PRINT  411,  X(5),  X(6),  X(7),  X(8)
411   FORMAT(4X,  E12.5,  1H,  E12.5,  1H,  E12.5,  1H,  E12.5)
C
C  МИНИМИЗАЦИЯ  ТИХОНОВСКОГО  ФУНКЦИОНАЛА
      CALL  POISK4(X,FX,N,DX,EPS,FM,NFE,FUN,OUT,1)
      STOP
      END

      SUBROUTINE  FIALPH(ALPHA,D,DT,H,NDIM,NY,T0,T1,Y,FA)
C  ФУНКЦИОНАЛ  ТИХОНОВА  ДЛЯ  РЕГУЛЯРИЗАЦИИ  ПОСЛОЙНО-БАЛАНСОВОГО  МЕТОДА
C  *******************************************************************
C  ВХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ
C  NY                              -  ДЛИНА  ВЕКТОРА  Y
C  NDIM                           =  2*NY
C  Y    (МКГ/КУБ.СМ/ЧАС)  -  СКОРОСТЬ  ОБРАЗОВАНИЯ  ГАЗА
C  ОПИСАНИЕ  ALPHA,D,DT,H,T0,T1  СМ.  В  ГОЛОВНОЙ  ПРОГРАММЕ  MINKO1
C
C  ВЫХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ
C  FA  -  ЗНАЧЕНИЕ  ФУНКЦИОНАЛА  ТИХОНОВА
```

[1] У автора в приведенном ниже литстинге в строках комментариев русские слова были написаны английскими буквами; для удобства читателей мы переписали их по-русски. Кроме того, для экономии места не приведены SUBROUTINE MATDEC и MATSOL. Их можно найти в [Glagolev, 2021] или в первоисточнике [Полак и др., 1984, с. 251–252]. — *Примечание издателей*.

DOI: doi.org/10.17816/edgcc90123

```
C  ********************************************************************
      DIMENSION  A(NDIM,NDIM)
      DIMENSION  B(NDIM),IPVT(NDIM),F(NDIM),T0(NY),T1(NY),Y(NY)
      INTEGER  I,J
      REAL  DDT,FF,H2,H2DDT
      DO  510  I=1,NY
      DO  510  J=1,NY
510   A(I,J)=0.0
      DDT=-D*DT
      H2=H*H
      H2DDT=H2-2*DDT
      DO  521  I=2,NY-1
      A(I,I+1)=DDT
      A(I,I)=H2DDT
      A(I,I-1)=DDT
521   B(I)=(Y(I)*DT+T0(I))*H2
      A(1,1)=1.0
      B(1)=T1(1)
      A(NY,NY-1)=1.0
      A(NY,NY)=-1.0
      B(NY)=0.0
      CALL  MATDEC(NY,NDIM,A,IPVT)
      CALL  MATSOL(NY,NDIM,A,IPVT,B,F)
      FA=0.0
      FF=0.0
      DO  530  I=1,NY-2
      FA=FA+(Y(I+2)-Y(I))**2
530   FF=FF+(T1(I+1)-F(I+1))**2
      FA=((3.*Y(1)-4.*Y(2)+Y(3))**2+(3.*Y(8)-4.*Y(7)+Y(6))**2)/8.+FA/4.
      FA=FA/H2
      FA=FF+0.5*(T1(NY)-F(NY))**2+ALPHA*FA
      RETURN
      END

C  ПОДПРОГРАММА  ВЫЧИСЛЕНИЯ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ
      SUBROUTINE  FUN(X,Y)
C  ********************************************************************
C  ВХОДНАЯ  И  ВЫХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ  -  СМ.  В  ОПИСАНИИ  SUBROUTINE  POISK4
C  ********************************************************************
      DIMENSION  X(1)
      COMMON  /COBLO0/  T0,  COMMON  /COBLO1/  T1,  COMMON  /COBLO2/  ALPHA,D,DT,H,N
      NDIM=2*N
      CALL  FIALPH(ALPHA,D,DT,H,NDIM,N,T0,T1,X,Y)
      RETURN
      END

C  ПОДПРОГРАММА,  ОРГАНИЗУЮЩАЯ  ВЫВОД  ПРОМЕЖУТОЧНЫХ  РЕЗУЛЬТАТОВ
      SUBROUTINE  OUT(X,FX,N,NFE)
C  ********************************************************************
C  ВХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ  -  СМ.  В  ОПИСАНИИ  SUBROUTINE  POISK4
C  ********************************************************************
      DIMENSION  X(1)
      PRINT  10,NFE,FX
10    FORMAT(7X,'NFE=',I9,3X,'FUNCTION=',E12.4)
      DO  20  I=1,N
20    PRINT  30,X(I)
30    FORMAT(4X,E12.4)
      RETURN
      END
```

DOI: doi.org/10.17816/edgcc90123

```
      SUBROUTINE  POISK4(X,FX,N,DX,EPS,FM,NFEMAX,FUN,OUT,IOUT)
C  *******************************************************************
C  ВХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ
C  DX         -  ВЕКТОР  НАЧАЛЬНЫХ  ПРИРАЩЕНИЙ  ПО  ПАРАМЕТРАМ.
C  EPS       -  ОТНОСИТЕЛЬНАЯ  ПОГРЕШНОСТЬ  НАХОЖДЕНИЯ  ОПТИМАЛЬНОЙ  ТОЧКИ
C            (РЕКОМЕНДУЕТСЯ  ЗАДАВАТЬ  В  ДИАПАЗОНЕ  0.00001-0.001).
C  FM         -  ЗНАЧЕНИЕ,  ДО  КОТОРОГО  НУЖНО  МИНИМИЗИРОВАТЬ  ЦЕЛЕВУЮ  ФУНКЦИЮ
C            (ПРИ  FX.LE.FM  ПОИСК  ПРЕКРАЩАЕТСЯ).
C  FUN       -  ИМЯ  ПОДПРОГРАММЫ  ВЫЧИСЛЕНИЯ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ.
C  N           -  КОЛИЧЕСТВО  ПЕРЕМЕННЫХ.
C  NFEMAX  -  МАКСИМАЛЬНОЕ  ЧИСЛО  ВЫЧИСЛЕНИЙ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ.
C
C  ВХОДНО-ВЫХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ
C  X  -  НАЧАЛЬНОЕ  ЗНАЧЕНИЕ  ВЕКТОРА  НЕЗАВИСИМЫХ  ПЕРЕМЕННЫХ  (НА  ВХОДЕ),
C        ПОЛУЧЕННОЕ  ЗНАЧЕНИЕ  ВЕКТОРА  НЕЗАВИСИМЫХ  ПЕРЕМЕННЫХ,  МИНИМИЗИРУЮЩЕЕ
C   ЦЕЛЕВУЮ  ФУНКЦИЮ  (НА  ВЫХОДЕ).
C
C  ВЫХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ
C  FX  -  ЗНАЧЕНИЕ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ  ПРИ  ПОЛУЧЕННОМ  ЗНАЧЕНИИ  ВЕКТОРА  X.
C  *******************************************************************
C  ТРЕБУЕМЫЕ  ПОДПРОГРАММЫ
C  FUN  -  ПОДПРОГРАММА  ВЫЧИСЛЕНИЯ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ.
C            ЕЕ  ВХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ  -  X  (ВЕКТОР  ЗНАЧЕНИЙ  ПЕРЕМЕННЫХ).
C            ЕЕ  ВЫХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ  -  Y  (ЗНАЧЕНИЕ  ФУНКЦИИ  ДЛЯ  ВЕКТОРА  X).
C  OUT  -  ПОДПРОГРАММА,  ОРГАНИЗУЮЩАЯ  ВЫВОД  ПРОМЕЖУТОЧНЫХ  РЕЗУЛЬТАТОВ.
C       ЕЕ  ВХОДНАЯ  ИНФОРМАЦИЯ  -  X  (ВЕКТОР  ЗНАЧЕНИЙ  ПЕРЕМЕННЫХ),
C            FX  (ЗНАЧЕНИЕ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ  В  ТОЧКЕ  X),  N  (РАЗМЕРНОСТЬ  ВЕКТОРА
C            X),  NFE  (ЧИСЛО  ВЫЧИСЛЕНИЙ  ЦЕЛЕВОЙ  ФУНКЦИИ).
C  *******************************************************************
C       ЭТА  ПОДПРОГРАММА  ПРИВЕДЕНА  В  КНИГЕ  КРУТЬКО  И  ДР.,  1988,  С.  272-275
      DIMENSION  X(N),DX(N),Y(10),Z(10),S(10,10),S1(10,10)
C    Y,Z  -  РАБОЧИЕ  МАССИВЫ  РАЗМЕРОМ  НЕ  МЕНЕЕ  N
C    S,S1  -  РАБОЧИЕ  МАССИВЫ  РАЗМЕРОМ  НЕ  МЕНЕЕ  (N,N)
      CALL  FUN(X,FX)
      NFE=1
      IF(IOUT.NE.0)  CALL  OUT(X,FX,N,NFE)
      IF(N.GT.1)  GO  TO  25
      PRINT  3
3     FORMAT('UNIDIMENSIONAL  SEARCH  IS  NECESSARY')
C    ОДНОМЕРНЫЙ  ПОИСК  В  ДАННОЙ  ВЕРСИИ  ПРОГРАММЫ  НЕ  РЕАЛИЗОВАН
      GO  TO  200
C    МНОГОМЕРНЫЙ  ПОИСК
25    DO  35  I=1,N
      DO  30  J=1,N
30    S(I,J)=0.
35    S(I,I)=DX(I)
      ALFA=1.
C    ЦИКЛ  ПО  НАПРАВЛЕНИЯМ  ПОИСКА
40    DO  95  I=1,N
      E=0.
      A=0.
      B=1.
      DO  45  J=1,N
      Y(J)=X(J)+ALFA*S(J,I)
45    E=E+ABS(Y(J)-X(J))/(ABS(X(J)+1.E-10))
C    ПРОВЕРКА  УСЛОВИЙ  ОКОНЧАНИЯ  ПОИСКА
      IF(E.LE.EPS.OR.FX.LE.FM.OR.NFE.GE.NFEMAX)  GO  TO  125
      CALL  FUN(Y,FY)
      NFE=NFE+1
      IF(FX.LE.FY)  GO  TO  55
      DO  50  J=1,N
      G=X(J)
      X(J)=Y(J)
```

```
50  Y(J)=G
    G=FX
    FX=FY
    FY=G
    G=A
    A=B
    B=G
55  DO  60  J=1,N
60  Z(J)=X(J)+(X(J)-Y(J))
    C=A+(A-B)
    CALL  FUN(Z,FZ)
    NFE=NFE+1
    IF(FX.LE.FZ.OR.FX.LE.FM.OR.NFE.GE.NFEMAX)  GO  TO  70
    DO  65  J=1,N
65  X(J)=Z(J)
    FX=FZ
    A=C
    GO  TO  55
C    КВАДРАТИЧНАЯ  ИНТЕРПОЛЯЦИЯ  ПО  ТОЧКАМ  Y,  X,  Z
70  D=(FY-FX)+(FZ-FX)
    IF(D.LE.0)  GO  TO  90
    GAMA=(FY-FZ)/(2.*D)
    DO  75  J=1,N
75  Y(J)=X(J)+GAMA*(X(J)-Y(J))
    CALL  FUN(Y,FY)
    NFE=NFE+1
    B=A+GAMA*(A-B)
    ALAM=ALFA*ABS(A-C)/SQRT(D)
    IF(ALAM.LT.0.25)  ALAM=0.25
    IF(ALAM.GT.4.)  ALAM=4.
    IF(B.LT.0.)  ALAM=-ALAM
    DO  80  J=1,N
80  S(J,I)=ALAM*S(J,I)
    IF(FX.LE.FY)  GO  TO  90
    DO  85  J=1,N
85  X(J)=Y(J)
    FX=FY
    A=B
90  IF(ABS(A).GT.ABS(ALAM))  ALFA=2.*ALFA
    IF(ABS(A).LT.0.25*ABS(ALAM))  ALFA=0.5*ALFA
    IF(A.NE.0..AND.IOUT.EQ.1)  CALL  OUT(X,FX,N,NFE)
95  CONTINUE
C    ПРЕОБРАЗОВАНИЕ  МАТРИЦЫ  НАПРАВЛЕНИЙ
    G=1./SQRT(FLOAT(N))
    DO  115  I=1,N
    IF(I.EQ.1)  GO  TO  100
    G=1./SQRT(FLOAT((N-I+2)*(N-I+1)))
    G1=FLOAT(N-I+1)*G
100 DO  110  J=1,N
    A=0.
    DO  105  K=1,N
105 A=A+S(J,K)
    A=G*A
    IF(I.NE.1)  A=G1*S(J,I-1)-A
110 S1(J,I)=A
115 CONTINUE
    DO  120  I=1,N
    DO  120  J=1,N
120 S(I,J)=S1(I,J)
    GO  TO  40
125 IF(IOUT.NE.0)  CALL  OUT(X,FX,N,NFE)
200 RETURN
    END
```

ЛИТЕРАТУРА

1. Агеев М.И., Алик В.П., Марков Ю.И. 1981. Библиотека алгоритмов 151б-200б. М.: Радио и связь. 184 с. [Ageev M.I., Alik V.P., Markov Yu.I. 1981. Biblioteka algoritmov 151b-200b. Moscow: Radio i svyaz'. P. 184 (In Russian)]
2. Безденежных А.А. 1973. Инженерные методы составления уравнений скоростей реакций и расчета кинетических констант. Л.: Химия. 256 с. [Bezdenezhnykh A.A. 1973. Inzhenernye metody sostavleniya uravnenii skorostei reaktsii i rascheta kineticheskikh konstant. Leningrad: Khimiya. P. 256 (In Russian)]
3. Белявский А.А., Белявский Б.А., Соловьев А.Н. 1979. Расчет оптимальной модели электронно-оптической системы одного класса СВЧ-приборов // Вопросы математического моделирования / Под ред. В.Ф. Крапивина. М.: ИРЭ АН СССР. С. 179–184. [Belyavskii A.A., Belyavskii B.A., Solov'ev A.N. 1979. Raschet optimal'noi modeli elektronno-opticheskoi sistemy odnogo klassa SVCh-priborov // Voprosy matematicheskogo modelirovaniya / Ed. V.F. Krapivina. Moscow: IRE Academy of Sciences of the USSR. P. 179–184 (In Russian)]
4. Березин И.С., Жидков Н.П. 1966. Методы вычислений. Т. 1. М.: Наука. 632 с. [Berezin I.S., Zhidkov N.P. 1966. Metody vychislenii. T. 1. Moscow: Nauka. P. 632 (In Russian)]
5. Бирюков В.В., Кантере В.М. 1985. Оптимизация периодических процессов микробиологического синтеза. М.: Наука. 296 с. [Biryukov V.V., Kantere V.M. 1985. Optimizatsiya periodicheskikh protsessov mikrobiologicheskogo sinteza. Moscow: Nauka. P. 296. (In Russian)]
6. Блохина И.Н., Угодчиков Г.А. 1980. Исследование динамики микробных популяций (системный подход). Горький: Волго-Вятское кн. изд-во. 168 с. [Blokhina I.N., Ugodchikov G.A. 1980. Issledovanie dinamiki mikrobnykh populyatsii (sistemnyi podkhod). Gor'kii: Publishing house Volgo-Vyatskoe kn. P. 168 (In Russian)]
7. Бондаренко Н.Ф., Журавлев О.С., Швытов И.А. 1981. Моделирование трансформаций органических веществ в почвах // Моделирование биогеоценотических процессов / Под ред. В.В. Галицкого. М.: Наука. С. 136–141. [Bondarenko N.F., Zhuravlev O.S., Shvytov I.A. 1981. Modelirovanie transformatsii organicheskikh veshchestv v pochvakh // Modelirovanie biogeotsenoticheskikh protsessov / Ed. V.V. Galitskogo. Moscow: Nauka. P. 136–141 (In Russian)]
8. Бояринов А.И., Кафаров В.В. 1969. Методы оптимизации в химической технологии. М.: «Химия». 564 с. [Boyarinov A.I., Kafarov V.V. 1969. Metody optimizatsii v khimicheskoi tekhnologii. Moscow: «Khimiya». P. 564 (In Russian)]
9. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. 1978. Методы решения интегральных уравнений с программами для ЭВМ. Киев: Наукова думка. 292 с. [Verlan' A.F., Sizikov V.S. 1978. Metody resheniya integral'nykh uravnenii s programmami dlya EVM. Kiev: Naukova dumka. P. 292 (In Russian)]
10. Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И. 1984. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск: Наука. [Voskoboinikov Yu.E., Preobrazhenskii N.G., Sedel'nikov A.I. 1984. Matematicheskaya obrabotka eksperimenta v molekulyarnoi gazodinamike. Novosibirsk: Nauka (In Russian)]
11. Глушков В.М., Иванов В.В., Яненко В.М. 1983. Моделирование развивающихся систем. М.: Наука. [Glushkov V.M., Ivanov V.V., Yanenko V.M. 1983. Modelirovanie razvivayushchikhsya sistem. Moscow: Nauka (In Russian)]
12. Гончар-Зайкин П.П., Дынкин Л.Д., Дынкин С.Д., Журавлев О.С. 1981. Модель газообмена в системе «микроорганизмы-почва-атмосфера» // Моделирование биогеоценотических процессов / Под ред. В.В. Галицкого. М.: Наука. С. 142–148 [Gonchar-Zaikin P.P., Dynkin L.D., Dynkin S.D., Zhuravlev O.S. 1981. Model' gazoobmena v sisteme «mikroorganizmy-pochva-atmosfera» // Modelirovanie biogeotsenoticheskikh protsessov / Ed. V.V. Galitskogo. Moscow: Nauka. P. 142–148 (In Russian)]
13. Гончарский А.В., Черепащук А.М., Ягола А.Г. 1985. Некорректные задачи астрофизики. М.: Наука. 352 с. [Goncharskii A.V., Cherepashchuk A.M., Yagola A.G. 1985. Nekorrektnye zadachi astrofiziki. Moscow: Nauka. P. 352 (In Russian)]
14. Гущина И.Я. 1979. Программа поиска точки минимума неотрицательной функции многих переменных, имеющей две производные по всем направлениям // Вопросы математического моделирования / Под ред. В.Ф. Крапивина. М.: ИРЭ АН СССР. С. 284–286. [Gushchina I.Ya. 1979. Programma poiska tochki minimuma neotritsatel'noi funktsii mnogikh peremennykh, imeyushchei dve proizvodnye po vsem napravleniyam // Voprosy matematicheskogo modelirovaniya / Ed. V.F. Krapivina. Moscow: IRE Academy of Sciences of the USSR. P. 284–286 (In Russian)]
15. Данилина Н.И., Дубровская Н.С., Кваша О.П., Смирнов Г.Л., Феклисов Г.И. 1976. Численные методы. М.: Высш. шк. 368 с. [Danilina N.I., Dubrovskaya N.S., Kvasha O.P., Smirnov G.L., Feklisov G.I. 1976. Chislennye metody. Moscow: Vyssh. shk. P. 368 (In Russian)]
16. Димитров В.И. 1982. Простая кинетика. Новосибирск: Наука. [Dimitrov V.I. 1982. Prostaya kinetika. Novosibirsk: Nauka (In Russian)]
17. Журавлев О.С., Гончар-Зайкин П.П., Коновалов Н.Ю. 1985. Классификатор типовых вариантов управления режимами воспроизводства гумуса в неоднородном почвенном покрове // Тезисы докладов VII делегатского съезда Всеоюзного общества почвоведов (9-13 сентября 1985 г., г. Ташкент). Ч. 3. Ташкент: Институт почвоведения и агрохимии АН УзССР. С. 23. [Zhuravlev O.S., Gonchar-Zaikin P.P., Konovalov N.Yu. 1985. Klassifikator tipovykh variantov upravleniya rezhimami vosproizvodstva gumusa v neodnorodnom pochvennom pokrove // Tezisy dokladov VII delegatskogo s"ezda Vseoyuznogo obshchestva pochvovedov (9-13 sentyabrya 1985 g., g. Tashkent). Ch. 3. Tashkent: Institut pochvovedeniya i agrokhimii Academy of Sciences of the USSR. P. 23 (In Russian)]
18. Калиткин Н.Н. 1978. Численные методы. М.: Наука. 512 с. [Kalitkin N.N. 1978. Chislennye metody. Moscow: Nauka. P. 512 (In Russian)]
19. Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Бояринов А.И. 1972. Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии. М.: Наука. [Kafarov V.V.,

Vetokhin V.N., Boyarinov A.I. 1972. Programmirovanie i vychislitel'nye metody v khimii i khimicheskoi tekhnologii. Moscow: Nauka (In Russian)]
20. Кафаров В.В., Винаров А.Ю., Гордеев Л.С. 1979. Моделирование биохимических реакторов. М.: Лесная пром-сть. 344 с. [Kafarov V.V., Vinarov A.J., Gordeev L.S. 1979. Modelling Biochemical Reactors. Moscow: Lesnaya Promyshlennost. P. 344 (In Russian)]
21. Кисляков Ю.Я. 1969. Алгоритм случайного спуска на АЛГОЛ-60 // Алгоритмы и программы случайного поиска / Под ред. Л.А. Растригина. Рига: Зинатне. С. 43–45. [Kislyakov Yu.Ya. 1969. Algoritm sluchainogo spuska na ALGOL-60 // Algoritmy i programmy sluchainogo poiska / Ed. L.A. Rastrigina. Riga: Zinatne. P. 43–45 (In Russian)]
22. Коваленко П.И. 1983. Автоматизация мелиоративных систем. М.: Колос. 304 с. [Kovalenko P.I. 1983. Avtomatizatsiya meliorativnykh sistem. Moscow: Kolos. P. 304 (In Russian)]
23. Ковда В.А. 1973. Основы учения о почвах. Общая теория почвообразовательного процесса. Кн. первая. М.: Наука. С. 33–34. [Kovda V.A. 1973. The principles of pedology. General theory of soil formation. First book. Moscow: Publishing house "Nauka". P. 33–34 (In Russian)]
24. Козловский Ф.И. 1977. О структуре миграции солевых растворов в почвах и ее значении при математическом моделировании солепереноса // Тезисы докладов V делегатского съезда Всеюзного общества почвоведов (11-15 июля 1977 г., г. Минск). Вып. VIII. Минск: Белорусский научно-исследовательский нститут почвоведения и агрохимии. С. 124–126. [Kozlovskii F.I. 1977. O strukture migratsii solevykh rastvorov v pochvakh i ee znachenii pri matematicheskom modelirovanii soleperenosa // Abstracts V delegatskogo s"ezda Vseoyuznogo obshchestva pochvovedov (11-15 iyulya 1977 g., g. Minsk). Issue VIII. Minsk: Belorusskii nauchno-issledovatel'skii nstitut pochvovedeniya i agrokhimii. P. 124–126 (In Russian)]
25. Копченова Н.В., Марон И.А. 1972. Вычислительная математика в примерах и задачах. М.: Наука. [Kopchenova N.V., Maron I.A. 1972. Vychislitel'naya matematika v primerakh i zadachakh. Moscow: Nauka (In Russian)]
26. Кошлак Г.Я. 1973. Основная программа № 0812: Неявный метод решения одномерного дифференциального уравнения в частных производных параболического типа // Набор программ для малой электронной цифровой вычислительной машины «Мир». Т. 2, Кн. 5. Киев: Наукова думка. С. 3–13. [Koshlak G.Ya. 1973. Osnovnaya programma № 0812: Neyavnyi metod resheniya odnomernogo differentsial'nogo uravneniya v chastnykh proizvodnykh parabolicheskogo tipa // Nabor programm dlya maloi elektronnoi tsifrovoi vychislitel'noi mashiny «Mir». T. 2, Book 5. Kiev: Naukova dumka. P. 3–13 (In Russian)]
27. Крутько П.Д., Максимов А.И., Скворцов Л.М. 1988. Алгоритмы и программы проектирования автоматических систем. М.: Радио и связь. 306 с. [Krut'ko P.D., Maksimov A.I., Skvortsov L.M. 1988. Algoritmy i programmy proektirovaniya avtomaticheskikh sistem. Moscow: Radio i svyaz'. P. 306 (In Russian)]
28. Куртенер Д.А., Чудновский А.Ф. 1979. Агрометеорологические основы тепловой мелиорации почв. Л.: Гидрометеоиздат. [Kurtener D.A., Chudnovskii A.F. 1979. Agrometeorologicheskie osnovy teplovoiålioratsii pochv. Leningrad: Gidrometeoizdat (In Russian)]
29. Лисецкий Ф.Н., Швебс Г.И. 1985. Обоснование и раскрытие составляющих модели оптимизации использования почвенных ресурсов // Тезисы докладов VII делегатского съезда Всесоюзного общества почвоведов (9-13 сентября 1985 г., г. Ташкент). Ч. 1. Ташкент: Институт почвоведения и агрохимии АН УзССР. С. 127. [Lisetskii F.N., Shvebs G.I. 1985. Obosnovanie i raskrytie sostavlyayushchikh modeli optimizatsii ispol'zovaniya pochvennykh resursov // Tezisy dokladov VII delegatskogo s"ezda Vseoyuznogo obshchestva pochvovedov (9-13 sentyabrya 1985 g., g. Tashkent). Ch. 1. Tashkent: Institut pochvovedeniya i agrokhimii Academy of Sciences of the UzSSR. P. 127 (In Russian)]
30. Ляшко И.И., Макаров В.Л., Скоробогатько А.А. 1977. Методы вычислений. (Численный анализ. Методы решения задач математической физики). Киев: Вища шк. 408 с. [Lyashko I.I., Makarov V.L., Skorobogat'ko A.A. 1977. Metody vychislenii. (Chislennyi analiz. Metody resheniya zadach matematicheskoi fiziki). Kiev: Vishcha shk. P. 408 (In Russian)]
31. Марчук Г.И. 1980. Методы вычислительной математики. М.: Наука. 536 с. [Marchuk G.I. 1980. Metody vychislitel'noi matematiki. Moscow: Nauka. P. 536 (In Russian)]
32. Мироненко Е.В., Пачепский Я.А. 1980. Водная миграция ионов и химических соединений в почвах. Линейные модели. Материалы по математическому обеспечению ЭВМ. Пущино. [Mironenko E.V., Pachepskii Ya.A. 1980. Vodnaya migratsiya ionov i khimicheskikh soedinenii v pochvakh. Lineinye modeli. Materialy po matematicheskomu obespecheniyu EVM. Pushchino (In Russian)]
33. Микеладзе Ш.Е. 1953. Численные методы математического анализа. М.: Гос. издат. тех.-теор. лит-ры. [Mikeladze Sh.E. 1953. Chislennye metody matematicheskogo analiza. Moscow: Publishing house tekh.-teor. lit-ry (In Russian)]
34. Носко Б.С., Чесняк Г.Я., Дуда Г.Г., Трускавецкий Р.С. 1985. Диагностика, моделирование и оптимизация плодородия основных типов почв УССР в интенсивных системах земледелия // Тезисы докладов VII делегатского съезда Всесоюзного общества почвоведов (9-13 сентября 1985 г., г. Ташкент). Ч. 3. Ташкент: Институт почвоведения и агрохимии АН УзССР. С. 3–6. [Nosko B.S., Chesnyak G.Ya., Duda G.G., Truskavetskii R.S. 1985. Diagnostika, modelirovanie i optimizatsiya plodorodiya osnovnykh tipov pochv USSR v intensivnykh sistemakh zemledeliya // Abstracts VII delegatskogo s"ezda Vseoyuznogo obshchestva pochvovedov (9-13 sentyabrya 1985 g., g. Tashkent). Ch. 3. Tashkent: Institut pochvovedeniya i agrokhimii Academy of Sciences of the UzSSR. P. 3–6 (In Russian)]
35. Орлов Д.С., Минько О.И., Аммосова Я.М., Каспаров С.В., Глаголев М.В. 1987. Методы исследования газовой функции почвы // Современные физические и химические методы исследования почв. М.: Изд-во МГУ. С. 118–156. [Orlov D.S., Min'ko O.I., Ammosova Ya.M., Kasparov S.V., Glagolev M.V. 1987. Metody issledovaniya

gazovoi funktsii pochvy // Sovremennye fizicheskie i khimicheskie metody issledovaniya pochv. Moscow: Publishing house MGU. P. 118–156 (In Russian)]
36. Паников Н.С. 1984. Использование кинетического подхода при изучении роста микроорганизмов в биогеоценозах // Микроорганизмы как компонент биогеоценоза / Под ред. акад. Е.Н. Мишустина. М.: Наука. С. 75–83. [Panikov N.S. 1984. Ispol'zovanie kineticheskogo podkhoda pri izuchenii rosta mikroorganizmov v biogeotsenozakh // Mikroorganizmy kak komponent biogeotsenoza / Ed. akad. E.N. Mishustina. Moscow: Nauka. P. 75–83 (In Russian)]
37. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. 1984. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука. 280 с. [Polak L.S., Gol'denberg M.Ya., Levitskii A.A. 1984. Vychislitel'nye metody v khimicheskoi kinetike. Moscow: Nauka. P. 280 (In Russian)]
38. Преображенский Н.Г., Пикалов В.В. 1982. Неустойчивые задачи диагностики плазмы. Новосибирск: Наука. С. 9. [Preobrazhenskii N.G., Pikalov V.V. 1982. Neustoichivye zadachi diagnostiki plazmy. Novosibirsk: Nauka. P. 9 (In Russian)]
39. Сиднева В.П., Яковлева М.Е. 1985. Вопросы математического моделирования по управлению известкованием почв // Тезисы докладов VII делегатского съезда Всеюозного общества почвоведов (9-13 сентября 1985 г., Ташкент). Ч. 1. Ташкент: Институт почвоведения и агрохимии АН УзССР. С. 133. [Sidneva V.P., Yakovleva M.E. 1985. Voprosy matematicheskogo modelirovaniya po upravleniyu izvestkovaniem pochv // Abstracts VII delegatskogo s"ezda Vseoyuznogo obshchestva pochvovedov (9-13 sentyabrya 1985 g.,Tashkent). Ch. 1. Tashkent: Institut pochvovedeniya i agrokhimii Academy of Sciences of the UzSSR. P. 133 (In Russian)]
40. Соболь И.М. 1973. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука. 312 с. [Sobol' I.M. 1973. Chislennye metody Monte-Karlo. Moscow: Nauka. P. 312 (In Russian)]
41. Фишман В.М., Бирюков В.В., Марьяш Б.З. 1969. Принципы математического описания промышленных микробиологических процессов // Инженерные проблемы микробиологического синтеза (Материалы всесоюзной конференции по проблемам биоинженерии) / Под ред. Е.С. Былинкиной и В.В. Бирюкова. М.: ВНИИ Антибиотиков. С. 219–226. [Fishman V.M., Biryukov V.V., Mar'yash B.Z. 1969. Printsipy matematicheskogo opisaniya promyshlennykh mikrobiologicheskikh protsessov // Inzhenernye problemy mikrobiologicheskogo sinteza (Materialy vsesoyuznoi konferentsii po problemam bioinzhenerii) / Ed. E.S. Bylinkinoi i V.V. Biryukova. Moscow: VNII Antibiotikov. P. 219–226. (In Russian)]
42. Bazaraa M.S., Shetty C.M. 1979. Nonlinear Programming Theory and Algorithms. New York *etc*.: John Wiley and Sons.
43. Collatz L. 1964. Funktionalanalysis und numerische mathematik. Berlin *etc*.: Springer-Verlag.
44. Cornish-Bowden A. 1976. Principles of Enzyme Kinetics. London *etc*.: Butterworth & Co.
45. Gill P.E., Murray W., Wright M.H. 1981. Practical Optimization. London *etc*.: Academic Press.
46. Glagolev M.V. 2021. Mathematical modeling in soil biokinetics // Environmental Dynamics and Global Climate Change. Vol. 12. No. 2. P. 123–144.
47. Himmelblau D.M. 1972. Applied Nonlinear Programming. – McGraw-Hill Book Company.
48. Huber P.J. 1981. Robust Statistics. New York *etc*.: John Wiley and Sons.
49. Lattes R., Lions J.-L. 1967. Methode de quasi-reversibilite et applications. Paris: Dunod.
50. Rosenbrock H.H., Storey C. 1966. Computational Techniques for Chemical Engineers. Oxford *etc*.: PERGAMON PRESS.
51. Shoup T.E. 1979. A Practical Guide to Computer Methods for Engineers. Englewood Cliffs, N.J.: PRENTICE-HALL, Inc.

Received: 09.09.2021
Revised: 20.11.2021
Accepted: 20.12.2021